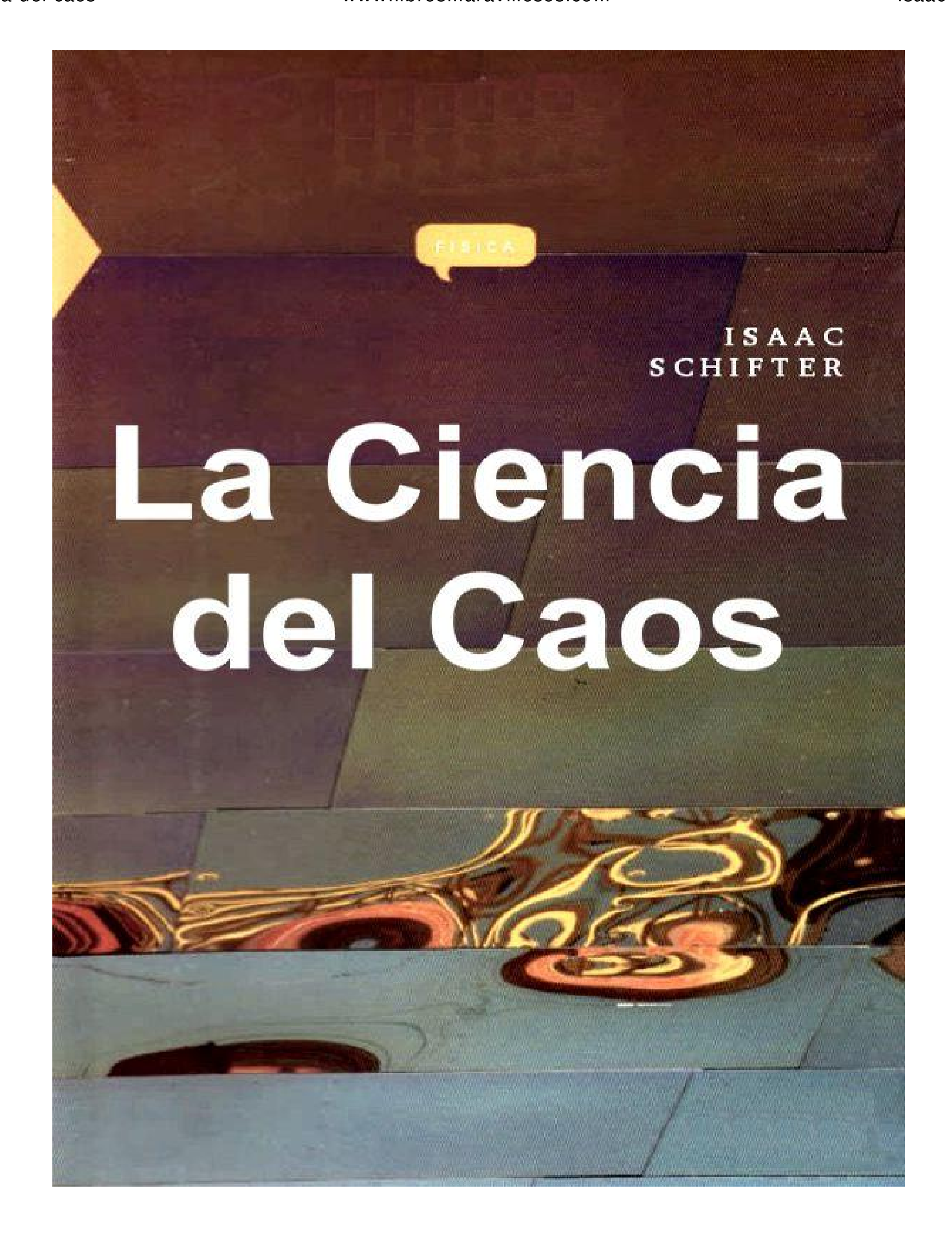

FISICA
ISAAC
SCHIFTER
La Ciencia
del Caos

El avance prodigioso de la ciencia hace pensar que los fenómenos de la naturaleza son predecibles, ya que se pueden escribir las leyes que dictan su comportamiento futuro. Nos cuenta el autor que dentro de la comunidad científica se refieren continuamente al caos, considerándolo una manifestación de procesos naturales y de experimentos que se llevan a cabo en los laboratorios y en los cuales la característica común es la imposibilidad de describirlos por leyes matemáticas simples. Más extraño es aún el hecho de que este tipo de fenómeno surge de aquellos que, en un principio, son deterministas.

Una ecuación simple bajo ciertas circunstancias se vuelve impredecible, una reacción química llevada a cabo en un simple tubo de ensayo se comporta aleatoriamente, la ecuación que describe la posición de Júpiter dentro de unos millones de años indica que dicho parámetro es imposible de predecir.

Todo sucede entonces como si las imágenes que uno ve muy nítidas en un principio, se tornan irreconocibles a medida que se alejan en el tiempo. Se entra así en el territorio del caos. El caos, aunque impredecible, está gobernado por las leyes deterministas, y más fascinante aún es que el sistema caótico súbitamente irrumpe en estados nuevamente ordenados.

¿Por qué existe este caos? ¿Cómo interviene en nuestra vida cotidiana y cuáles son sus consecuencias? Estas cuestiones constituyen el tema principal de este libro.

A Wolf Schifter

Índice

Prefacio

1. Los mitos del caos
2. La química del caos
3. Caos y bioquímica

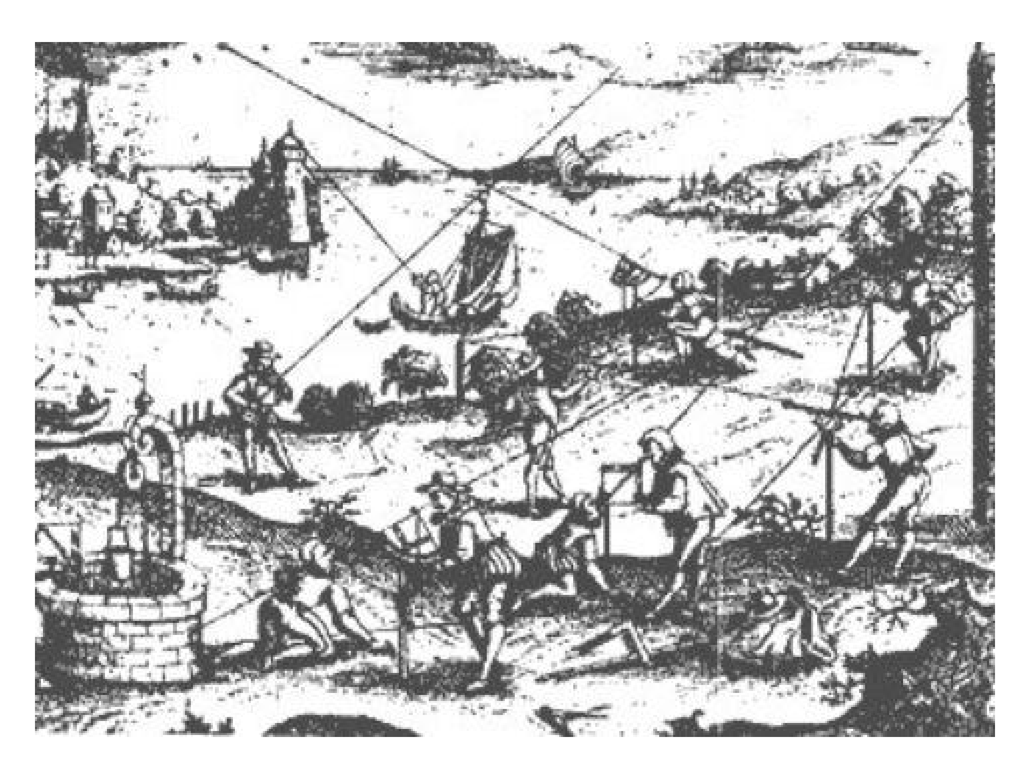
Epílogo

Bibliografía

Prefacio

El matemático francés Pierre Simon de Laplace afirmaba categórico, en 1776, que si se conociera la velocidad y la posición de todas las partículas del Universo en un instante dado, entonces se podría predecir su pasado y futuro para el resto de los siglos. Existen, claro está, dificultades obvias para satisfacer la propuesta de Laplace, pero por más de cien años su afirmación pareció correcta y, más aún, la aplicación literal de esos conceptos al comportamiento humano condujo a la conclusión filosófica de que el libre albedrío no existía ya que todo estaba determinado. Sin embargo, a pesar de esas aventuradas conclusiones, la experiencia nos enseña que existen fenómenos naturales que son impredecibles y para ello baste el ejemplo del pronóstico del tiempo: si bien la atmósfera se mueve obedeciendo las mismas leyes de la física que rigen el movimiento planetario, considerado por muchos como el arquetipo de la predecibilidad, no podemos saber con certeza si debemos o no salir con el paraguas. ¿Por qué? Los meteorólogos responden que bajo ciertas circunstancias el flujo del aire se comporta en forma obediente y se le pueden aplicar ecuaciones que lo describen rigurosamente, pero, en otras situaciones su movimiento es caótico y no se sabe qué pasará. El desorden es precisamente el personaje principal de este relato y, a la pregunta del lector respecto a qué es lo que lo causa, nos adelantamos diciéndole que ¡NADA!; siempre ha existido y hoy en día sabemos que su presencia en muchos fenómenos es más común de lo que pensábamos hace algunos años. Los científicos que estudian los comportamientos caóticos en diversos campos concuerdan en que una nueva concepción de la ciencia se ha gestado, y esperamos poder convencer al lector de lo importante que resulta este descubrimiento. A manera de advertencia, debemos indicar que el tema sobrepasa nuestra capacidad de abarcarlo en todas las facetas que presenta en los diversos campos de la ciencia, y los que tratamos en este texto tampoco se estudian con la profundidad que merecen.

Esperamos que la lectura de estas notas sirva para que el lector se interese más sobre ellos; los resultados de la búsqueda, podemos apostar, cambiarán la idea que tiene de la ciencia y ¿por qué no?, de su propia vida.



«Medirlo todo se convirtió en manía...»

Capítulo 1
Los mitos del caos

Contenido:

1. *El caos determinista*
2. *El colapso de la predicción*
3. *Borges y el desorden*
4. *El azar*
5. *El determinismo*
6. *Un determinismo disfrazado de azaroso*
7. *Las rutas del caos*
8. *El caos*
9. *El número 4.6692016091029909...*
10. *Todo depende del inicio*
11. *¿Dónde está el planeta?*
12. *Las mariposas de Lorenz*
13. *Los diagramas de fases*
14. *Atractores sorprendentes*
15. *La turbulencia*
16. *Las células de Bérnard*
17. *El helio en convulsión*
18. *El agua también es desordenada*
19. *Caos y mezclas*

La metafísica ocupa un lugar importante dentro del conocimiento humano, ya que el hombre al preguntarse acerca del origen del mundo, lo hace también del suyo propio. Es tan sencillo como decir que la metafísica empieza donde termina el lenguaje de la ciencia. A pesar de que los griegos tuvieron filosofía y los judíos sólo religión, es interesante hacer notar que el pensamiento metafísico fue más acentuado en los griegos. A diferencia de los mitos babilónicos y griegos, en los cuales el mundo tiene su origen en peleas entre los dioses paganos, en el Antiguo Testamento se hace un planteamiento racional, no antropomórfico e incluso casi

científico del origen del mundo. Si nos referimos al texto del Antiguo Testamento vemos que la primera de las especificaciones teológicas es el enunciado del estado caótico original de la Tierra, el cual se plantea con la ayuda de una serie de conceptos corrientes en el pensamiento cosmológico sacerdotal. *Tohuwabowu* significa lo informe, la masa primigenia de aguas rodeada de tinieblas, designa al caos en su aspecto material como un elemento primordial líquido, pero suscita al mismo tiempo una asociación con el aspecto dimensional: *tehom* = océano caótico es el abismo cósmico (la palabra está relacionada lingüísticamente con Tiamat, el dragón babilónico del caos, cuya destrucción a manos de Marduk permite la creación del Universo). Edmundo Valadés (*El libro de la imaginación*) nos narra la siguiente versión de la creación proveniente de la teogonía náhuatl.

> *El mundo estaba lleno de agua. Y en el agua vivía la Señora de la Tierra. Era un monstruo cubierto de ojos y de fauces. Tezcatlipoca y Quetzalcóatl decidieron darle forma a la Tierra. Convertidos en serpientes, enlazaron y estrecharon al monstruo hasta que se rompió en sus dos mitades. Con la parte inferior hicieron la Tierra y con la parte superior el cielo. Los otros dioses bajaron a consolarla y, para compensar el daño que Tezcatlipoca y Quetzalcóatl acababan de hacerle, le otorgaron el don de que su carne proporcionara cuanto el hombre necesita para vivir en el mundo.*

Tras todo lo creado subsiste el abismo de lo informe, que puede ser continuamente engullido por ese abismo; el caos constituye, en suma, una perpetua amenaza para las criaturas. Cuando hablamos de caos, la primera idea que nos viene a la mente es de carácter negativo, como una imperfección, algo que causa inquietud y, más aún, se ve como una forma del Mal. El tema, como dice Pierre Tuiller, filósofo e historiador de la ciencia, ha sido uno de los más discutidos, y en todas las mitologías, religiones y filosofas se ha tratado de resolver la pregunta clave: ¿cuál es el orden universal?

1. El caos determinista

En años recientes, parte de la comunidad científica en todo el mundo ha comenzado a hablar incesantemente de *caos, desorden, aperiodicidad*, para explicar muchos

fenómenos que se suceden en la naturaleza y en experimentos controlados de laboratorio, que se caracterizan por tener un comportamiento que no puede ser descrito por leyes matemáticas sencillas. Más extraño aún es el hecho de que este tipo de caos emerge de fenómenos cuya evolución es inicialmente determinista. Contrariamente a lo que podría esperarse, al aumentar la cantidad de información disponible no se evita la imposibilidad de conocer la progresión futura del sistema. Dicha evolución queda determinada por su pasado y una de las propiedades peculiares del caos es que la mínima incertidumbre en la definición de las condiciones iniciales se amplifica exponencialmente, alcanzando proporciones macroscópicas que impiden conocer lo que sucederá a largo plazo.

El descubrimiento del caos determinista ha forzado un cambio sustancial en la filosofía de la ciencia: por una parte, establece límites a nuestra capacidad para predecir un comportamiento; por otra, abre un nuevo espacio para comprender muchos fenómenos aleatorios que suceden en varios campos del conocimiento. Sin embargo, la aceptación que estos fenómenos han tenido entre los científicos no ha sido general, el polvo de la casa a veces se suele esconder cómodamente debajo de la alfombra, pero tarde o temprano requerirá de nuestra atención. El polvo afea el orden, pues si existe un componente de aleatoriedad o de imperfección se destruyen las simetrías intrínsecas que simplifican la predicción física. Sin embargo, a pesar de que se niegue su existencia las evidencias son contundentes: el polvo se manifiesta en la física a escalas tan microscópicas como es la distribución de los niveles de energía en ciertos sistemas atómicos; en química se describen reacciones oscilatorias en las que, una vez desencadenadas, al cabo de cierto tiempo parece regresarse a los reactivos de partida. En los movimientos de los planetas de nuestro Sistema Solar también encontramos comportamientos desordenados, así como en los cambios climáticos, el ritmo cardiaco, la vida económica y las epidemias que atacan a la humanidad, por nombrar sólo algunos. Definir el concepto de *desorden* no es una tarea fácil ya que cada quien tiene una idea propia de él. En ciertos casos evoca un estado de confusión, una disposición de cosas más o menos irregular, pero independientemente de los giros semánticos la idea general es que el orden ha sido gravemente perturbado. El desorden se presenta entonces como algo que nunca debió haber existido y en el dominio de las ciencias se le acusa de delincuente que

viola las «leyes de la naturaleza». Durante mucho tiempo, la ciencia ha hecho suyo el credo de que detrás de los desórdenes aparentes de la naturaleza siempre existe un orden escondido. Predecesores de esta filosofía son los pitagóricos y Platón. Para este último el estado ideal del Cosmos es cuando cada cosa está en su lugar. La racionalidad del Cosmos la interpreta como el resultado de una operación efectuada por un poder ordenador, una figura semi-mítica a la que llama Demiurgo, especie de «obrero» que ordena el desorden al crear el Cosmos, palabra que significa en primer lugar *belleza, arreglo, orden* y en segunda instancia, *mundo*, es decir, *orden del mundo*. Nos dice Platón:

> *Con todo aquello en desorden, el dios insertó proporciones en cada cosa respecto de sí y respecto de los demás, esas simetrías eran tan abundantes como fue posible y se encontraban en las cosas ajustadas según proporción y medida común [...] todas esas partes primero fueron ordenadas y luego se constituyó con ellas ese todo, viviente único que contiene en sí mismo a todos los vivientes mortales e inmortales.*

El mundo es matemáticamente ordenado y el trabajo del hombre de ciencia consiste en encontrar las estructuras racionales que sirvieron de modelo al Demiurgo. Según Platón, en el campo de los elementos microscópicos estas formas perfectas se identifican con los poliedros regulares, en particular con el círculo. Por ello los astrónomos, hasta Kepler, redujeron todas las trayectorias celestes a círculos o combinaciones de ellos. Sin embargo el mismo Platón, aunque obsesionado por el orden, le presta gran atención a los desórdenes y sugiere que el orden ideal no puede ser jamás instaurado de manera absoluta en los objetos materiales. Hay algo que se resiste, que impide a las estructuras matemáticas realizarse perfectamente: la Naturaleza emergida de las manos del Demiurgo es sede de una agitación permanente.

Podemos, por tanto, afirmar que la ciencia ha estado influida durante muchos siglos por los conceptos de Platón, quien delinea tres niveles principales de jerarquización. En el nivel superior se encuentran las ideas y formas matemáticas que constituyen los modelos ideales de todas las cosas. Es el dominio del ORDEN. Al otro extremo se

encuentra el CAOS, estado primordial carente de orden y desorden, que escapa a toda descripción.

Entre esos dos niveles está nuestro mundo, resultado del trabajo del Demiurgo, que tiene un poco de orden y desorden. Aunque idealmente es ordenado y obedece a leyes deterministas, no está exento de carácter aleatorio. Uno de los postulados que ha regido la ciencia nos dice que existen regularidades en la sucesión temporal de los eventos que ocurren en el universo material y en algunas características mensurables de los sistemas materiales relativamente aislados, cuando están en equilibrio. Como afirma A. Rosenblueth, este principio es la esencia del determinismo o la causalidad, puesto que implica que es posible predecir el futuro de un sistema si se conocen en un momento dado las condiciones de los elementos que lo constituyen. Las ecuaciones que empleaba la física clásica para expresar sus leyes, tanto las que se referían a los equilibrios como las que expresaban los procesos dinámicos, tenían una forma que implicaba relaciones causales precisas y rigurosa entre sus variables; eran, por lo tanto, compatibles con las formulaciones filosóficas del principio de causalidad.

2. El colapso de la predicción

Una de las primeras sacudidas a la sólida estructura del determinismo la proporcionó la conocida teoría cinética de los gases, desarrollada por J. G. Maxwell y luego perfeccionada por L. Boltzmann. En ella se trata de concebir y analizar los mecanismos ocultos presentes en un gas, y con ello explicar las propiedades manifiestas en el nivel macroscópico (volumen, temperatura, presión). Supusieron que las sustancias estaban compuestas de átomos, pero en lugar de razonar en forma individual, manejaron el problema en forma estadística y calcularon promedios basándose en el principio de que la energía del gas se distribuye uniformemente entre las partículas que lo componen (principio de equipartición de la energía). Maxwell y Boltzmann, como nos dice P. Tuiller, hacen emerger el orden del caos, pues las regularidades observadas en el nivel macroscópico provienen de la incapacidad que tenemos para predecir las trayectorias individuales de los átomos.

El lenguaje de la estadística es una manera subjetiva de analizar la objetividad de la naturaleza. Recurrimos a ella no porque los acontecimientos sean de naturaleza azarosa, sino porque desconocemos subjetivamente cuál va a ser el curso que van a tomar dichos acontecimientos. Cada una de las partes que integran los sistemas de la naturaleza tiene una historia individual, pero como integran sistemas tan complejos, en los cuales interviene un número tan grande de partes, es imposible conocer la historia individual de cada parte y por ello debemos recurrir a la estadística.

La estructura determinista termina de colapsarse con la aparición de la teoría de la mecánica cuántica, en particular con el principio de incertidumbre de Heisenberg, el cual postula que no se puede medir al mismo tiempo la posición y la velocidad de una partícula. Si se requiere precisar dónde está la partícula, su momento lineal se vuelve indefinido y viceversa: al tratar de definir la velocidad dentro de límites estrechos, menos se sabe dónde se halla la partícula. De lo anterior se deduce que de acuerdo con la mecánica cuántica, cualquier medida inicial es siempre insegura y que el caos asegura que las incertidumbres sobrepasan la habilidad de hacer cualquier predicción.

No es de extrañar que la teoría cuántica tuviese numerosos opositores cuando fue elaborada. De acuerdo con el principio de incertidumbre de Heisenberg, el macroorden de la naturaleza dependería del microcaos de los procesos íntimos de la materia. En el campo de las ciencias naturales, el embate contra el determinismo fue similar. Un ejemplo lo constituyen las teorías sobre la genética desarrolladas por Gregor Mendel, formuladas en 1865, pero que fueron aceptadas a partir de 1900. Antes de los trabajos de Mendel se admitía como cierto el dogma de la génesis, según la cual las especies fueron creadas en pares únicos, hembra y macho, en un punto de la Tierra a partir del cual se propagaron. Una especie que tenía características intermedias entre dos de ellas era considerada un híbrido, un mutante, algo que rompía el orden y debía desaparecer para regenerar el modelo deseado por el Creador. Las leyes de Mendel sobre la hibridación aportaron a la biología un concepto revolucionario para su época, el cual indica que los organismos no se reproducen a sí mismos y por tanto no transmiten sus propios caracteres, sino que procrean aportando a sus descendientes sólo la mitad de su patrimonio

genético. Contó los granos y aplicó los métodos preestadísticos de su época, basándose en la ley de grandes números, pero sin conocer a fondo la teoría matemática. De su trabajo se deduce que las mezclas de especies siempre son posibles y que resultan tan fecundas como sus progenitores, mientras que los híbridos, cuando llegan a ser viables son frecuentemente estériles. No obstante, el grado de esterilidad no se encuentra asociado estrictamente con la afinidad de las formas, pues está gobernado por leyes complicadas y todavía escasamente conocidas.

Tal vez el más destacado de los científicos de las ciencias naturales haya sido Charles Darwin, quien decía simplemente que las variaciones aleatorias, seleccionadas en forma ciega, pueden engendrar toda la diversidad de formas vivientes. He aquí otro buen ejemplo del *desorden* que engendra el *orden*.

En resumen podemos decir que existe una ciencia del desorden, de la cual describiremos algunos ejemplos en el curso de esta obra, pero a diferencia de la ciencia platónica, su existencia misma no hace desaparecer los desórdenes que ella estudia. En cierta escala, todos los fenómenos son desordenados, irregulares y no pueden reducirse a formas puras. La ciencia del caos encuentra el desorden escondido entre un aparente orden real.

3. Borges y el desorden

Prosigamos esa historia del caos con un cuento... de Jorge Luis Borges. En «La lotería de Babilonia» el personaje central relata que este juego formaba parte principal de la realidad, y si bien poca gente lo jugaba, una organización, llamada La Compañía, despertó el interés del público al incorporar unos cuantos resultados negativos dentro de los números favorables. La lotería era secreta, gratuita y general. Todos participaban en los sorteos y las consecuencias eran incalculables, pues el asesinato de alguien o el descubrimiento de un tesoro podía ser el resultado de numerosos sorteos previos. Si la lotería era una periódica infusión del caos en el Cosmos, mejor sería que el azar interviniese en todas las etapas del sorteo y no en uno solo. Ninguna decisión es final y todas se ramifican en otras. Cuenta el personaje que hay quien dice que La Compañía no existe y que el desorden de nuestras vidas es puramente hereditario, mientras que otros declaran que es

omnipotente, pero sólo influye en cosas minúsculas (como por ejemplo, el aleteo de una mariposa). ¿Se suceden los hechos al azar o funciona el mundo siguiendo reglas que podemos descubrir? Si decimos que el mundo tiene un sentido, y si éste es perfectamente inteligible, esto significa que el pasado y el futuro están abiertos ante nosotros como un libro. Por el contrario, si negamos lo anterior, no es posible discernir ninguna regla y si no entendemos el pasado, menos podremos predecir el futuro. La verdad, parece ser, se encuentra a medio camino entre esas dos aseveraciones, pero antes de abogar por ella, presentemos las dos versiones.

4. El azar

El azar, según una definición clásica, es la intersección de series causales independientes. Lo aleatorio, en oposición al determinismo, es la independencia del pasado y del futuro. Un personaje del cuento de Borges sale de su casa y después de caminar un tiempo le cae un objeto encima que lo mata: ¿fue el azar? Hay quien afirma que no existen las series causales independientes en nuestro Universo: al caminar, el personaje ejerce en la calle una fuerza de atracción sobre el objeto que lo va a matar, ya que la cantidad de viento que desplaza en su movimiento es inseparable de todo un contexto meteorológico en el que la actividad pasada de la víctima ha tenido su contribución. A veces uno oye decir que los movimientos de los planetas obedecen leyes rigurosas, mientras que la tirada de un dado es fortuita o sujeta al azar. Karl Popper decía que la diferencia entre estas dos cosas reside en el hecho de que no somos capaces de predecir los resultados individuales de las tiradas de un dado. Para deducir predicciones se necesitan leyes y condiciones iniciales: si no se dispone de leyes apropiadas o si no se pueden averiguar las condiciones iniciales, el modo científico de predecir se desmorona. Sin duda alguna, cuando tiramos un dado no tenemos el conocimiento suficiente de las condiciones iniciales; si dispusiéramos de mediciones suficientemente precisas también sería posible hacer predicciones en este caso, pero las reglas para tirar el dado correctamente están elegidas de tal modo que nos impiden medir las condiciones iniciales, por lo tanto decimos que el proceso es aleatorio.

5. El determinismo

Por otra parte, A. Rosenblueth en su libro *Mente y cerebro* nos describe con acierto uno de los postulados científicos que se han adoptado en la ciencia, del cual ya hablamos con anterioridad.

Según éste, existen regularidades en la sucesión temporal de los fenómenos que ocurren en el universo material y hay características que son mesurables en los sistemas materiales relativamente aislados cuando están en equilibrio. Éste es el postulado del determinismo o de la causalidad, y según él, es posible predecir los estados futuros de un sistema material si se conocen en un momento dado las condiciones de los elementos que lo constituyen. Todo lo que se producirá mañana tiene una causa hoy, y un conocimiento bastante preciso de la causa permitirá predecir el efecto. Dos tipos de situaciones se presentan en los sistemas materiales: en el primero el tiempo es una de las variables, mientras que en el segundo no existe tal variable. En cualquiera de los dos casos la herramienta clásica que se emplea para describirlos es la ecuación diferencial.

Si un fenómeno está regido por ella, su evolución está totalmente inscrita en su estado presente: el conocimiento perfecto de éste permite reconstruir su pasado y predecir su futuro. La ecuación diferencial es una relación válida en cada instante entre la posición de un móvil, su aceleración y su velocidad. Cuando se integra la ecuación se deduce la trayectoria del móvil y su desplazamiento sobre ésta. Una relación instantánea entre la posición y la velocidad permite determinar por completo tanto una como otra, siempre y cuando se conozca la posición en el instante inicial. Elí de Gortari (*Ensayos filosóficos sobre la ciencia moderna*) llama la atención sobre ciertas restricciones que tiene el determinismo. El presente físico implica siempre un lapso de cierta duración y, por lo tanto, las condiciones iniciales no son estrictamente instantáneas.

Lo anterior implica que el sistema sigue evolucionando durante la condición inicial tomada como punto de partida, por lo cual es irrealizable la previsión estrictamente rigurosa del estado del sistema en un instante dado. Otro punto importante es que para conocer exactamente la posición en el instante inicial es necesario hacer una medición perfecta, cosa imposible ya que las mediciones científicas están siempre afectadas por errores experimentales, además, al medir perturbamos el sistema, pues destruimos su aislamiento.

6. Un determinismo disfrazado de azaroso

Hoy en día se ha llegado a la conclusión de que una ley puramente determinista puede manifestarse por fenómenos totalmente aleatorios. Esta característica está dada por el carácter no lineal de las ecuaciones matemáticas que modelan el sistema físico. Dado que estas ecuaciones no permiten una solución analítica exacta los científicos han tenido dificultades para construir teorías que permitan su predicción. Mucho se ha avanzado gracias al uso de las computadoras, que han permitido al matemático explorar e identificar pautas de comportamiento indispensables. Esta nueva aproximación, en la que interviene una combinación de «experimentos» numéricos y de análisis matemático, ha dado origen a un campo llamado dinámica no lineal. Quienes trabajan en él usan el término *caos* para referirse al comportamiento irregular e impredecible, aunque determinista, de los sistemas no lineales. Un primer ejemplo de un sistema no lineal, muy sencillo, que exhibe una transición de un comportamiento regular a uno caótico es el generado por la llamada ecuación logística. Para profundizar en ella sólo necesitamos papel, lápiz y una calculadora sencilla.

El primer paso para desarrollar la ecuación consiste en definir una variable X; para aquéllos que no les gusta trabajar con una simple letra, podemos sugerir que asocien la letra con una idea menos abstracta, como una población de insectos, la cantidad de una sustancia que reacciona en un vaso o bien, si se desea, el número de personas de una población que han oído un chiste (el lector podrá darle a X el sentido que su imaginación le dicte).

Así, el sistema está descrito por una sola variable X, es decir que para definir toda la evolución del mismo, bastará conocer el valor que toma X en cierto instante dado. Para simplificar aún más las cosas diremos que la variable tiempo sólo puede tener valores enteros. El modelo deberá entonces ser capaz de predecir el valor de X_{sig} a partir del último calculado, es decir, el valor de X; veamos cómo sucede esto:

$$X_{sig} = K (1 - X) X \qquad \text{(ecuación 1)}$$

X_{sig} será el siguiente valor calculado a partir de X; K es una constante que será detallada más, adelante.

¡Empecemos! Supongamos que X vale 0.04 y K, 2.7. Calculemos el valor de X_{sig}:

$$X_{sig} = 2.7\ (1 - 0.04)\ 0.04$$

El resultado es 0.10368. Si ahora repetimos la operación, pero empleando X =0.1, el resultado será 0.2430 y así continuamos resolviendo la ecuación, aumentando en cada caso el valor de X hasta llegar a 1. Una imagen, dice el refrán, vale más que mil palabras, hagamos pues una gráfica en donde en el eje horizontal dispongamos los valores de X empleados y en el vertical los que resultan de estas simples operaciones. En la figura 1 se muestra el resultado de nuestro cálculo.

Bueno, se preguntará el lector, ¿qué de extraordinario tiene dicha gráfica? Pues nada, hasta ahora; los biólogos conocen esta ecuación, descrita por P. Verhulst en el siglo pasado, que fue propuesta para modelar el crecimiento de una población de insectos en un medio ambiente limitado. La gráfica nos indica que cuando la densidad de población es inicialmente pequeña, las generaciones siguientes serán más numerosas, pero sólo hasta un límite, a partir del cual el crecimiento disminuye. La sobrepoblación, el incremento en la mortalidad, la competencia por el alimento y muchos otros factores hacen que la población disminuya, como se observa en la presencia de valores altos de X. Se asume que la población no sigue un crecimiento exponencial incontrolable, como lo había predicho el economista inglés T. Malthus en 1798, basándose en una ecuación del tipo:

$$X_{sig} = K\ X \qquad \text{(ecuación 2)}$$

De acuerdo con su modelo, Malthus predecía que si no se ponía un «freno moral» (matrimonios aplazados y continencia sexual) no tardaría mucho para que la humanidad agotara la cantidad de alimentos disponibles. La ecuación del inglés describe un crecimiento lineal, mientras que nuestra ecuación (afortunadamente) genera un arco parabólico que empieza a elevarse desde el origen, llega a un máximo y desciende simétricamente hasta alcanzar nuevamente el cero. La

constante K hace que la altura del máximo se modifique, hecho que se puede demostrar si graficamos la ecuación empleando un valor diferente de K.

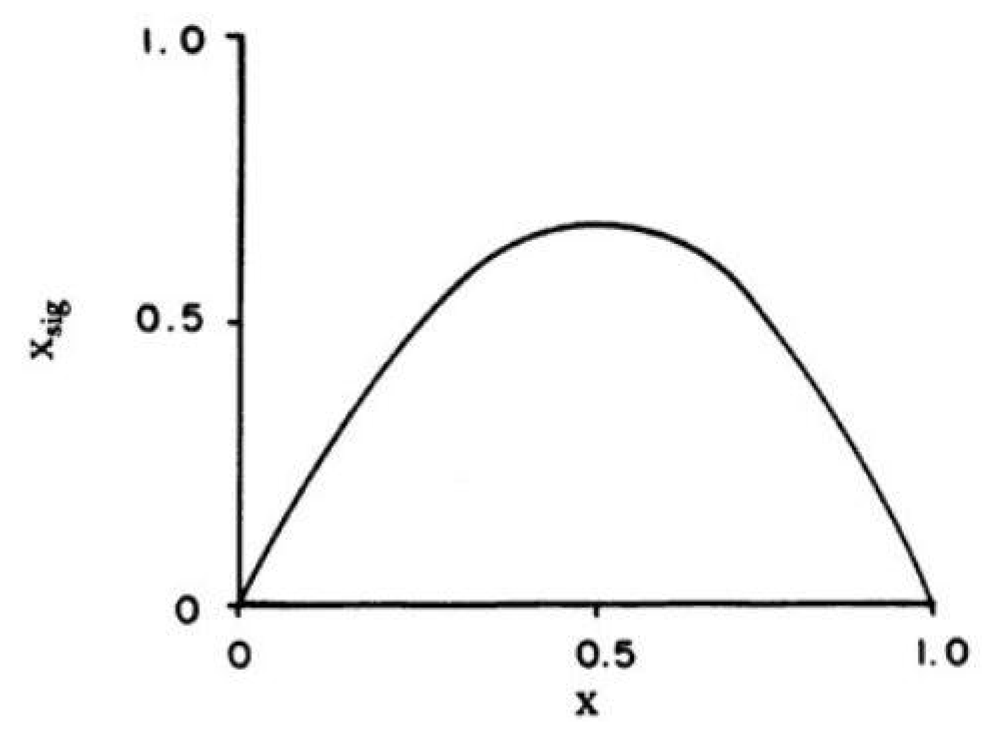


Figura 1. Forma típica de la relación entre X y Xsig, descrita por la ecuación logística, K = 2.7.

Hagamos una pequeña modificación a nuestro cálculo: con el mismo valor de K = 2.7, usemos inicialmente el de X =0.04. El valor de Xsig que se obtiene se sustituye como nueva X y se obtiene otra Xsig; repitamos la operación sesenta veces (en matemáticas a esto se le llama iterar la ecuación). Veamos cómo se obtienen los dos primeros valores: El primer resultado es 0.10368, como ya lo vimos antes; ahora calculemos con él el siguiente:

$$X_{sig} = 2.7\ (1 - 0.10368)\ 0.10368$$

que nos produce 0.25091. A partir de la iteración número dieciocho el producto es 0.6296. Si se da cualquier otro valor inicial entre cero y uno y se itera, se obtendrá el mismo valor final 0.6296.

La figura 2 muestra una gráfica de las operaciones realizadas al iterar la ecuación; en el eje vertical están dispuestos los valores de X y en horizontal los de Xsig. Una manera sencilla de realizar las iteraciones sin necesidad de calcularlas con una máquina, la presentamos en esta misma figura 2. Hemos trazado una recta punteada que parte del origen, cuya expresión equivale a X = Xsig. Supongamos que partimos del valor inicial 0.04; si trazamos una línea vertical hasta tocar la curva y luego una horizontal que toque la recta punteada, tendremos el valor de X_{sig} y de esa manera repetimos la operación tal y como se describe mediante los trazos con flecha realizados en la figura. Como se puede observar, se llega a un punto fijo en el cual convergen todas las trayectorias generadas por las iteraciones.

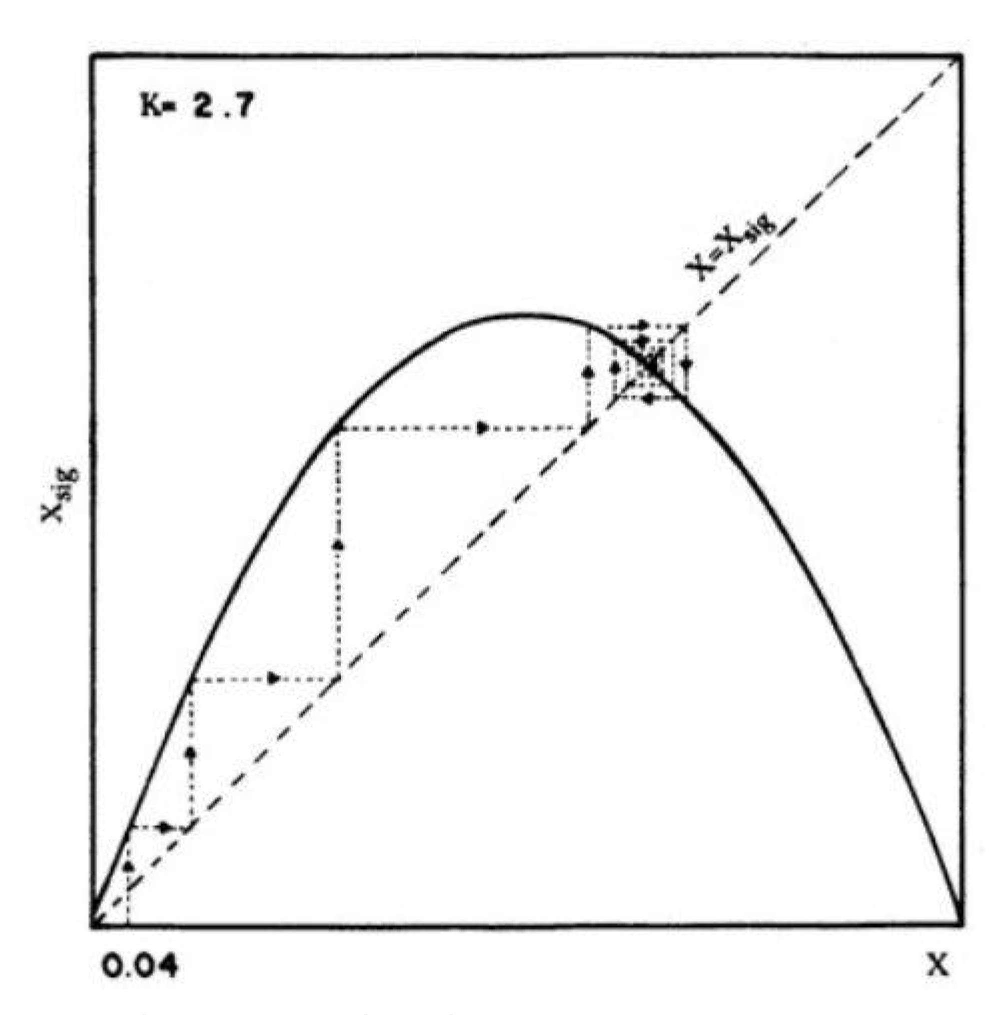


Figura 2. Iteración de la ecuación logística para K = 2.7. Presencia de un atractor.

En la figura 3 se muestra el mismo desarrollo de la ecuación descrita, salvo que hemos modificado el valor de K a 3.15. En este caso el punto fijo deja de ser estable y a pesar de que inicialmente atrae las órbitas hacia él, se genera una bifurcación en la que aparecen dos puntos estables (marcados como X_1 y X_2 en la gráfica) que, independientemente del valor inicial escogido, «atraen» todas las órbitas que se generen por la iteración de la ecuación. Debemos aclarar que en dinámica se llama bifurcación al cambio en el número de soluciones posibles para una ecuación cuando se varía un elemento, en este caso, el valor de K. El asunto empieza a ponerse interesante… Hagamos otro análisis de la ecuación empleando ahora K = 3.53. Los resultados están representados de una manera diferente en la figura 4; ahora en el eje horizontal está anotado el número de iteraciones de la ecuación y en el vertical el valor resultante de la variable X. El periodo dos se ha bifurcado y ahora existe un ciclo de cuatro valores. En lugar de continuar describiendo el comportamiento de la ecuación para diferentes valores individuales de K, presentamos en la figura 5 una vista general del modelo por medio de un diagrama de bifurcación en el cual en el eje horizontal se disponen los diferentes valores de K de 3.5 hasta 4 y en el eje vertical los de Xsig normalizados de cero a uno; cada valor de la figura se ha obtenido iterando la ecuación más de cien veces. La gráfica de la dinámica irregular de la ecuación logística nos da una imagen del caos. Como muchos de los sistemas no lineales que existen en la naturaleza, el modelo matemático exhibe un comportamiento que parece azaroso a pesar del hecho de que las ecuaciones que describen su comportamiento son enteramente deterministas. Los resultados nos enseñan que si K se sitúa entre uno y tres, pensando en el modelo de crecimiento poblacional de los insectos, los valores iniciales evolucionan a una población que alcanza un equilibrio.

Figura 3. Iteración de la ecuación logística para K= 3.15. Presencia de dos tractores con valores X_1 y X_2.

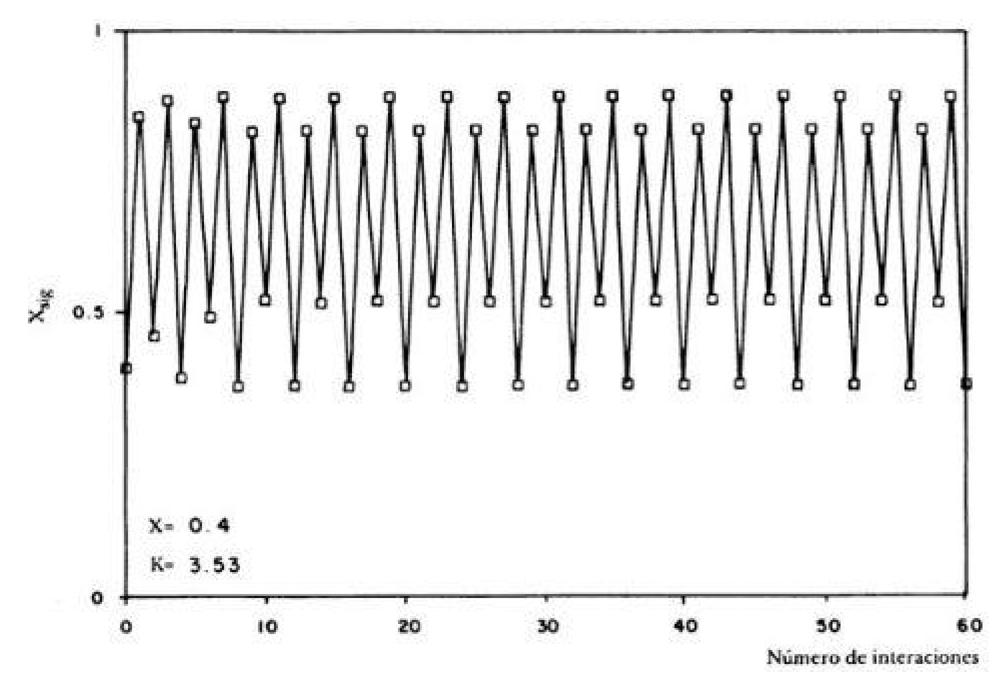


Figura 4. Valores de X para 60 iteraciones de la ecuación logística para K = 3.53. Ciclo de cuatro valores.

7. Las rutas del caos

Al incrementarse K entre 3 y 4 la dinámica cambia en forma notable y aparecen bifurcaciones de orden 2 que son reemplazadas por ciclos en los que se alternan cuatro valores, que luego serán de 8, 16, 32, 64 (como decía Borges, «la decisión final no existe, se ramifica en otras»). Este proceso, al que se le suele llamar duplicación periódica, es una secuencia que antecede el periodo caótico y también se le denomina bifurcación en forma de tenedor, ya que su forma recuerda tal instrumento. Este mecanismo de duplicación periódica ha sido muy estudiado ya que representa una de las rutas hacia el caos y como veremos más adelante, es común en muchos sistemas dinámicos reales. Si el lector analiza con detalle la figura 5 puede notar que las regiones de comportamiento caótico se ven interrumpidas por intervalos de comportamiento periódico, uno de ellos se presenta cuando el valor de K es 3.569, otro mucho más prolongado ocurre en las vecindades de K=3.83 pero aquí se presenta un ciclo de tres valores estables al inicio del periodo, que permanece durante un corto lapso para luego desencadenar nuevamente un comportamiento caótico. Un esquema de este mecanismo se

muestra en la figura 6. Este último proceso en cual las bifurcaciones son impares representa otra de las rutas hacia el caos y se le conoce como intermitencia del tipo I, fenómeno que posteriormente estudiaremos en sistemas dinámicos naturales.

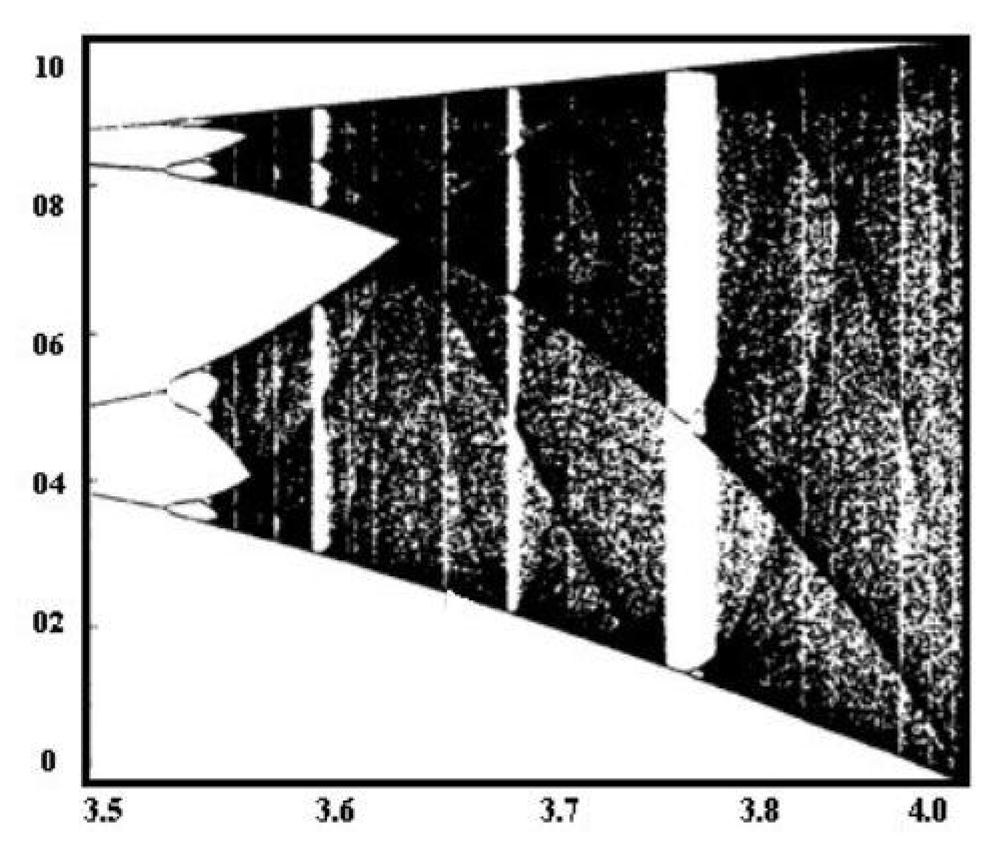


Figura 5. Diagrama de bifurcaciones de la ecuación logística cuando K varía de 3.5 a 4. En el eje horizontal se encuentra el valor de K, en el vertical los de X.

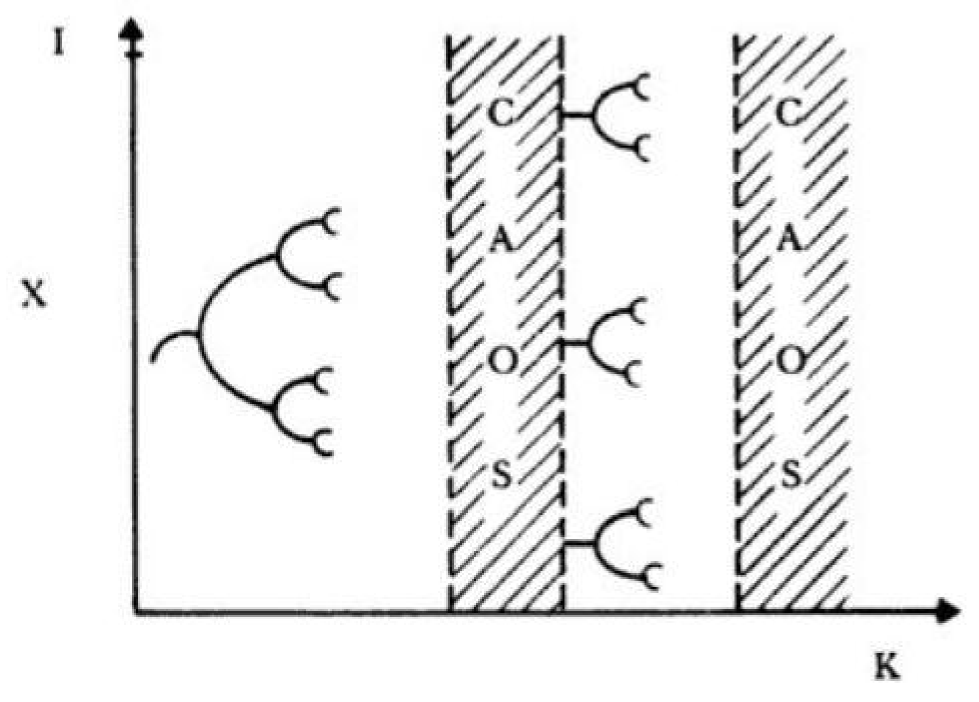


Figura 6. Detalle del diagrama de bifurcaciones en la ecuación logística para el ciclo de periodo tres.

8. El caos

¿Qué pasa cuando el valor de K es mayor de cuatro? La situación cambia en forma importante.

Considérese la figura 7, en la cual gráficamente presentamos los resultados de la ecuación para cinco valores de K que van desde 4.0001 a 4.0005 con un valor inicial de X = 0.4. En el eje vertical se representa el número de iteraciones que llegan hasta 200 y en el horizontal el valor siguiente de X. Como se observa, cuatro de las cinco ecuaciones se salen rápidamente de la escala negativa en las primeras 200 iteraciones, pero el orden que siguen es totalmente inesperado. La primera que se sale de la escala es la que tiene el valor de 4.0004, luego sigue la de 4.0003, y después la de 4.0005. En la iteración 200 sólo la que emplea el valor de K = 4.0002 sigue en el rango entre cero y uno, hemos entrado en el régimen caótico en el cual la periodicidad es difícil de predecir. Volvamos un momento al ejemplo del biólogo que sigue el crecimiento de la población de insectos: supongamos que cada iteración de la ecuación representa un año, por tanto, sólo uno de los sistemas representados en la figura anterior será estable por dos centurias, lo cual deja más

que satisfecho a nuestro científico con su predicción. Sin embargo, si cada iteración representa una semana, el periodo de estabilidad deducido será mucho menor.

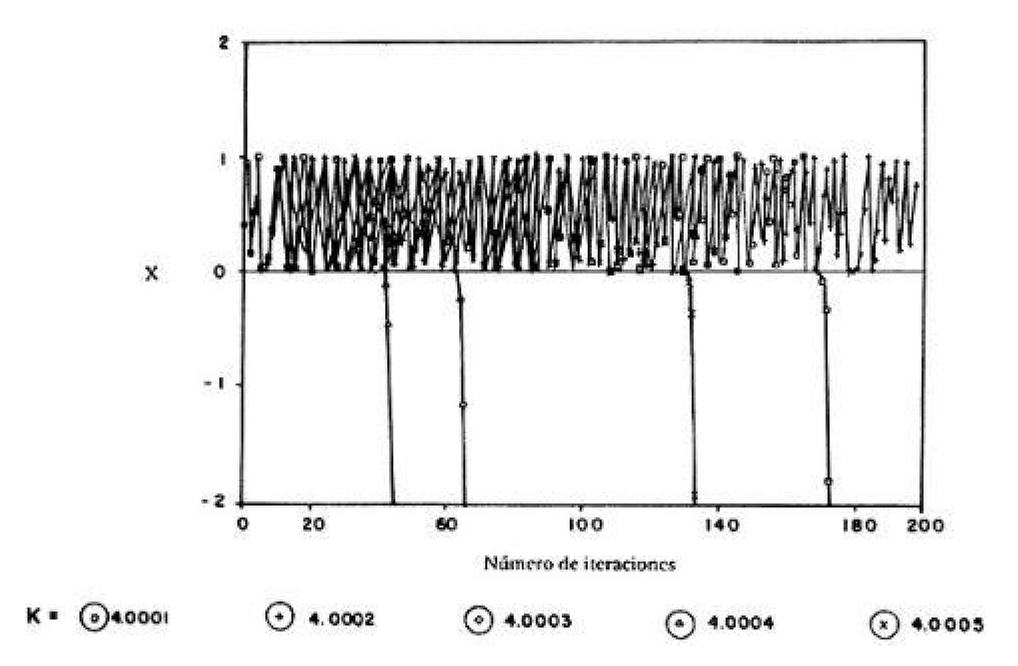


Figura 7. Iteración de la ecuación logística para cinco valores de K mayores de cuatro

9. El número 4.6692016091029909...

Una conclusión interesante que resulta del estudio de la «inocente» ecuación logística es que las bifurcaciones periódicas son una de las rutas hacia el caos, pero lo notable de este hecho es que dicho mecanismo es válido para cualquier ecuación que tenga un solo valor K. La universalidad de este proceso se reproduce sin importar la física detallada o la descripción del modelo teórico que se estudie. Más aún, la dinámica de fenómenos que transitan de la estabilidad al caos por el mecanismo de la bifurcación se realiza de una manera que puede evaluarse cuantitativamente, lo cual fue descubierto por M. Feigenbaum entre otros, un físico estadounidense que analizó los datos de la famosa ecuación con su calculadora.

Hagamos un esquema para entender lo que Feigenbaum encontró, véase la figura 8. En la parte superior del diagrama hemos anotado un eje de valores para X que va de cero a uno, tal como lo hicimos con la ecuación logística. Los símbolos K1 hasta K6 representan valores de la constante en los cuales se sucede una bifurcación. Si

vemos la secuencia de arriba hacia abajo se nota que cada punto es reemplazado por dos «gemelos». Según el primer número *universal* descubierto por Feigenbaum, la distancia entre los números gemelos es 2.5029078750958... veces más pequeña que la que existe entre los puntos que les dieron origen. El lector minucioso podrá ver que cada secuencia de puntos que se origina una línea abajo reproduce el modelo global de la que le antecede, salvo que están más juntos. Feigenbaum encontró además que el cociente de diferencias en los valores de K requeridos para llevarse a cabo una bifurcación, por ejemplo ($K_3 - K_2$ / $K_4 - K_3$), es constante y vale 4.66201... para cualquier sistema no lineal unidimensional. Más adelante veremos que en los fenómenos físicos reales el paso a la dinámica caótica se lleva a cabo por un mecanismo similar al descrito teóricamente por las observaciones de Feigenbaum.

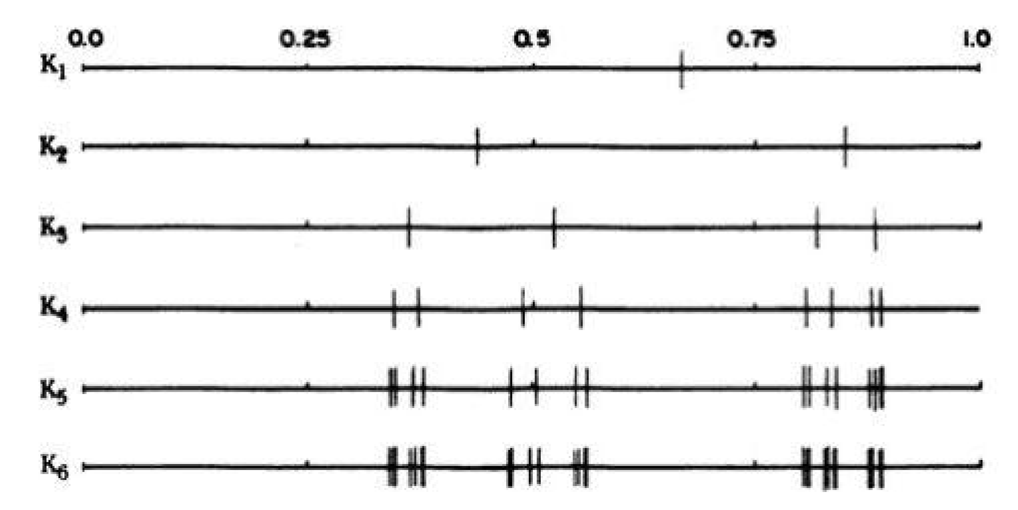


Figura 8. Bifurcaciones periódicas de la ecuación logística.

10. Todo depende del inicio

Una conclusión muy importante que se deriva del estudio del caos fue claramente descrita por Henri Poincaré en 1908. Este notable matemático francés, empleando las herramientas del cálculo, escribió la siguiente conclusión de sus trabajos sobre las ecuaciones que describen la evolución temporal de varios sistemas: «una causa muy pequeña, que se nos escapa, determina un efecto notable que no podemos ver y decimos entonces que tal efecto se debe al azar.».

Al referirse a la definición de las condiciones iniciales que deben emplearse (por ejemplo, en nuestro caso sería el valor dado a X en la ecuación logística), nos dice que por más que se trate de precisarlas, éstas serán siempre aproximadas y:

> [...] *puede suceder que pequeñas diferencias en las condiciones iniciales engendren unas aún mayores en el fenómeno final, un pequeño error en las primeras produciría uno enorme sobre las segundas. La predicción se vuelve imposible y tenemos el fenómeno fortuito.*

Para ver en la práctica lo dicho por Poincaré debemos recurrir nuevamente a nuestra ecuación.

Empleando una K = 4.00 se calculan los resultados de las iteraciones con dos valores iniciales ligeramente diferentes entre sí, por ejemplo X = 0.4000 por una parte y X = 0.4001 por la otra. (El cuadro de la página siguiente muestra algunos de los valores que se obtienen).

Para la sexta iteración la diferencia ha llegado al cuarto decimal, pero en la 21 está ya en el primero, es decir que cualquier efecto, no importa lo pequeño que sea, alcanza proporciones macroscópicas y la diferencia en los resultados crece exponencialmente. Una manera de obtener una medida de la sensibilidad de un sistema a las condiciones iniciales fue descrita por el matemático ruso A. M. Lyapunov (1857-1918). Supongamos que partimos de la ecuación logística dando dos valores iniciales que difieren muy poco entre sí, por ejemplo, X y X+ε, e iteramos la ecuación *n* veces. Lyapunov encontró que la divergencia puede caracterizarse aproximadamente por una fórmula que nos dice que el valor de la diferencia iterada n veces es aproximadamente igual a $\varepsilon e^{\lambda n}$.

Núm iteraciones	*Valores de Xsig*		*Diferencia*
0	0.4000	0.40001	-0.000010
6	0.025466	0.025261	0.000205
21	0.774403	0.554030	0.220373

La letra λ es conocida como el exponente de Lyapunov, y nos da una velocidad promedio a la cual se separan las dos trayectorias. Si el exponente es negativo, las trayectorias poco separadas en el inicio tenderán a converger y la evolución no será

caótica. Por el contrario, si el exponente es positivo las trayectorias divergen y la evolución es sensible a las condiciones iniciales y por tanto es caótica. En la figura 9 el exponente se grafica como función del valor K de la ecuación logística para valores entre 2.8 y 4.0. Si comparamos esta figura con la número 5 observamos que el signo del exponente se correlaciona muy bien con el comportamiento del sistema, es decir, que los valores positivos corresponden a las bifurcaciones, mientras que los negativos se asocian al comportamiento periódico en la región entre 3.5 y 4 del valor de K.

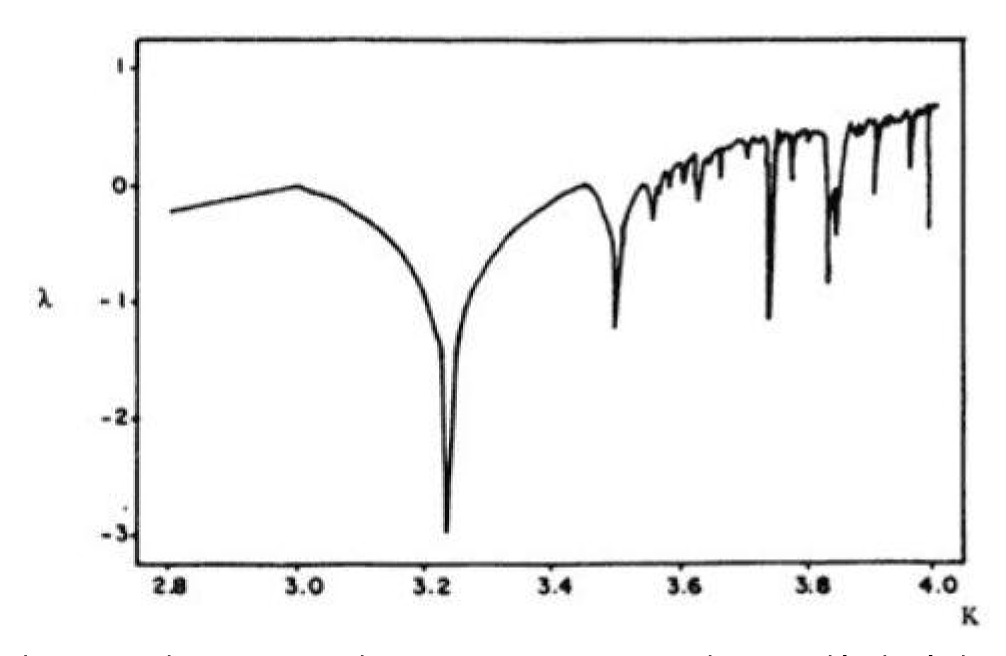


Figura 9. El exponente de Lyapunov vs. K para la ecuación logística.

11. ¿Dónde está el planeta?

Quizá el lector piense que exageramos la nota cuando hablamos de sistemas imposibles de predecir por su extrema sensibilidad a las condiciones iniciales. Para convencerlo de que estamos en lo cierto, veamos lo que sucede cuando se quiere conocer la posición futura de los planetas que constituyen el Sistema Solar. Siempre hemos tenido la idea de que el movimiento de los planetas es la imagen misma de la regularidad. Nuestro reloj cósmico se remonta a unos 5.000.000.000 de años, que es el tiempo estimado que ha transcurrido desde la creación del Sistema Solar. La ley de Newton de la gravitación universal permite modelar el movimiento de esos cuerpos, claro está, introduciendo las correcciones necesarias debidas a la

relatividad general para los planetas próximos al Sol. La ley provee una relación entre las aceleraciones de los cuerpos y sus posiciones. El sistema se puede modelar perfectamente si se conocen las condiciones iniciales en las que se introducen las coordenadas de posición y las de velocidad para un instante dado. Pero aun con esos datos la resolución de las ecuaciones para estos sistemas no permite conocer las posiciones y velocidades para cualquier valor del tiempo. Tampoco arroja luz sobre cómo varían las trayectorias si uno modifica ligeramente las condiciones iniciales. El único ejemplo cuya solución de ecuaciones da un valor exacto es el descrito para el caso de un planeta único que gira alrededor del Sol: el problema se puede integrar y la solución indica que el planeta se mueve alrededor de una elipse. Sin embargo; en la práctica los planetas describen movimientos más complejos debido a la perturbación que introduce la atracción de los cuerpos celestes entre sí y la presencia de asteroides, cometas y otros objetos cuya existencia ignoramos. Gracias a los trabajos de Laplace y Lagrange referentes al estudio de la estabilidad del Sistema Solar se obtuvieron métodos que permiten encontrar soluciones aproximadas a las ecuaciones de movimiento de los planetas, pero como fue demostrado por Poincaré tras sesudas demostraciones matemáticas, los resultados no permiten conocer la estabilidad del sistema en periodos muy extensos. Más recientemente, las computadoras han permitido hacer cálculos que tiempo atrás hubiesen tomado años de trabajo; así, dos investigadores del Instituto Tecnológico de Massachusetts, Estados Unidos, realizaron la integración de ecuaciones de movimiento de los planetas más externos de nuestro sistema para los próximos 845.000.000 de años. La integración numérica indicó que Plutón tiene un movimiento caótico. El exponente de Lyapunov se estimó a partir de la divergencia que tenían las órbitas, una de ellas especificada a partir de valores de referencia y la otra teórica y muy próxima a la primera. La distancia que separa a las dos órbitas se multiplica por un factor de tres cada 20.000.000 de años, lo que hace imposible cualquier predicción sobre la excentricidad y la inclinación de la órbita más allá de los 400.000.000 de años. En otra simulación de los planetas internos (Mercurio, Venus, Tierra y Marte), J. Laskar, en Francia, llegó a la siguiente conclusión: es posible precisar la posición de los planetas hasta 100 millones de años más, a partir de esta fecha las excentricidades e inclinaciones tienen una

dinámica caótica, más aún, un error de 0.00000001% en la estimación de los valores iniciales aumenta a 100% en cien millones de años.

12. Las mariposas de Lorenz

En 1963 el meteorólogo Eduard Lorenz, interesado en obtener un modelo que predijera el clima, trabajaba con una computadora para desarrollar un sistema que simulara el complejo movimiento de la atmósfera. El modelo había sido simplificado al máximo: una capa de aire próxima a la superficie se eleva por el calentamiento que le provoca la radiación solar absorbida en el suelo.

El programa de cálculo incluía un conjunto de tres ecuaciones diferenciales cuyas variables representaban el movimiento, la variación horizontal y vertical de la temperatura. Lorenz pidió a la máquina que a partir de ciertos valores iniciales que él propuso, calculara los datos correspondientes para diferentes intervalos, por medio de iteraciones como las que ya describimos.

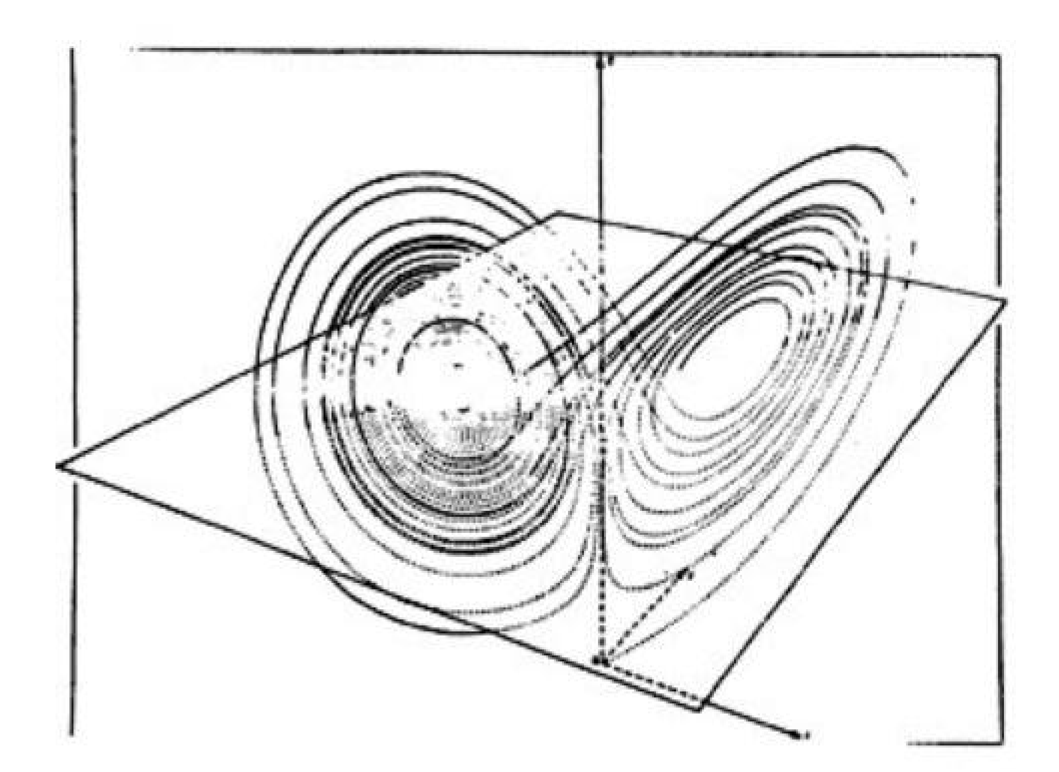


Figura 10. El atractor de Lorenz.

Cada uno de los resultados fue impreso en una gráfica de tres ejes (X, Y, Z) y cada uno representa una de las variables del modelo. Para su asombro, los valores obtenidos formaron una figura parecida a una mariposa con sus alas desplegadas, véase la figura 10.

Los resultados de Lorenz, a pesar de haber aparecido en una revista técnica, pasaron inadvertidos para la comunidad científica. La figura del modelo de Lorenz no es otra cosa que la manifestación de la inestabilidad exponencial. En meteorología se sabe que la amplitud de una perturbación se duplica cada tercer día. A una condición inicial dada, es decir, cierto estado de la atmósfera en la superficie del planeta (presión, temperatura, humedad) le corresponde una evolución futura perfectamente determinista. No obstante si se modifican ligeramente las condiciones iniciales, por ejemplo, si algún miembro poderoso de La Compañía, del cuento de Borges, hace que una mariposa agite sus alas, este pequeño cambio tal vez no tenga repercusiones en los primeros instantes o días. Sin embargo, ya lo hemos visto con las iteraciones, la modificación se amplificará y si se duplicará cada tercer día, se multiplicará por 300 cada mes y por 100 000 cada dos meses y llegará a ser 10^{30} por año.

Si reflexionamos sobre los hechos anteriores vemos también que en los sistemas caóticos existe una pérdida de información con el paso del tiempo. Si uno conoce el estado de un sistema con N decimales en el tiempo inicial, $t = 0$, únicamente podremos conocer $N - 1$ en el instante siguiente $t = 1$, y por tanto $N - n$ en el instante $t = n$ hasta perder toda la información anterior cuando $t = N$. Esto es parte de las características de la inestabilidad exponencial: los errores se multiplican hasta degradar toda la información de partida. Para un sistema que posee esta propiedad, sea unidimensional como el caso de la ecuación logística o multidimensional y complejo como es la atmósfera, la dinámica misma es la única capaz de revelarnos la información que estaba contenida en las condiciones iniciales. En el caso de la meteorología esto quiere decir que el tiempo que observaremos dentro de un año revelará información sobre el estado de la atmósfera que prevaleció hoy. Considérese que las medidas que se determinan en las ciencias experimentales nunca son definidas más allá de la incertidumbre ligada a la medición, y los instrumentos más precisos que poseemos hoy en día nos dan

valores que no pasan de las doce cifras, límite de precisión para las constantes físicas. Visto desde otro ángulo, cuando la dinámica del sistema caótico nos permite conocer la treceava cifra revela una nueva información creada de la nada. De lo anterior se resume que la evolución futura de tal sistema depende del estado que podemos constatar en este momento... ¡y del azar!, aunque es claro que siempre tenemos el recurso de echar mano de las leyes de cálculo de probabilidades que permiten estimar el comportamiento promedio de dichos sistemas en el tiempo. Por tanto, la definición tradicional de un sistema azaroso, mejor dicho estocástico, sólo puede ser descrita en términos de propiedades promedio dadas por una distribución probabilística determinada. ¿Se puede diferenciar desde ese punto de vista una secuencia aleatoria de la generada por el caos determinista? Veamos un ejemplo sencillo de este problema; utilizaremos una ecuación que nos permite calcular el valor siguiente a partir del que le precede:

$$X_{sig} = 1 - K X^2 \qquad \text{(ecuación 3)}$$

Digamos que inicialmente X vale 0 y K siempre vale 1.5, invitamos al lector a realizar el cálculo de los primeros doce resultados. Ahora reemplacemos por A aquellos valores cuyos resultados son menores de cero y por B los mayores de cero. La serie obtenida se escribirá: B A B B B B B A B B B A. Ahora tómese una moneda y anótese las veces que cae águila, que llamaremos A, y las que cae sol, que denominaremos B. Supongamos que la secuencia obtenida es: A B B A B B A A B A B A. Para una persona que no sea muy observadora, la primera secuencia obtenida a partir de una ecuación muy sencilla le parecerá muy similar a la de la moneda, ya que no puede especular cuál será el valor siguiente a partir de la secuencia de dígitos que tiene ante sí. Comprobar que una serie es rigurosamente aleatoria no es tarea fácil y los matemáticos someten los resultados a pruebas estadísticas exhaustivas para estar seguros de ello. Se podría pensar que lanzar la moneda resulta la manera más clásica de producir una serie de números aleatorios, pero en el fondo no es así, ya que, por ejemplo, si lanzamos la moneda 20 veces se puede generar 220 (es decir, un poco menos de un millón) series binarias de secuencias y cada una de ellas con la misma posibilidad de hacerse presente. Por lo tanto, según

la definición técnica de caos, un sistema dinámico caótico es aquél que exhibe muchos de los atributos de los sistemas ideales aleatorios; en esencia su evolución es impredecible debido a la extrema sensibilidad a las condiciones iniciales y el promedio de sus propiedades se puede describir empleando métodos estadísticos.

Si quisiéramos transmitir a una persona la secuencia de A y B que surge de la ecuación logística en la zona caótica, y no conociéramos la fórmula que dio origen a los valores, emplearemos una computadora y le daríamos un programa de instrucciones (un algoritmo) a fin de que la máquina pudiera reproducir paso a paso dicha secuencia en forma explícita sin que tuviera que comprender el resultado de cualquier parte de la información que proporciona. Los científicos A. N. Kolmogorov y G. J. Chaitin han definido que una serie de números es aleatoria si el algoritmo más pequeño que se le puede especificar a la computadora tiene el mismo número de bits (1 bit es la unidad fundamental de información) que la propia serie.

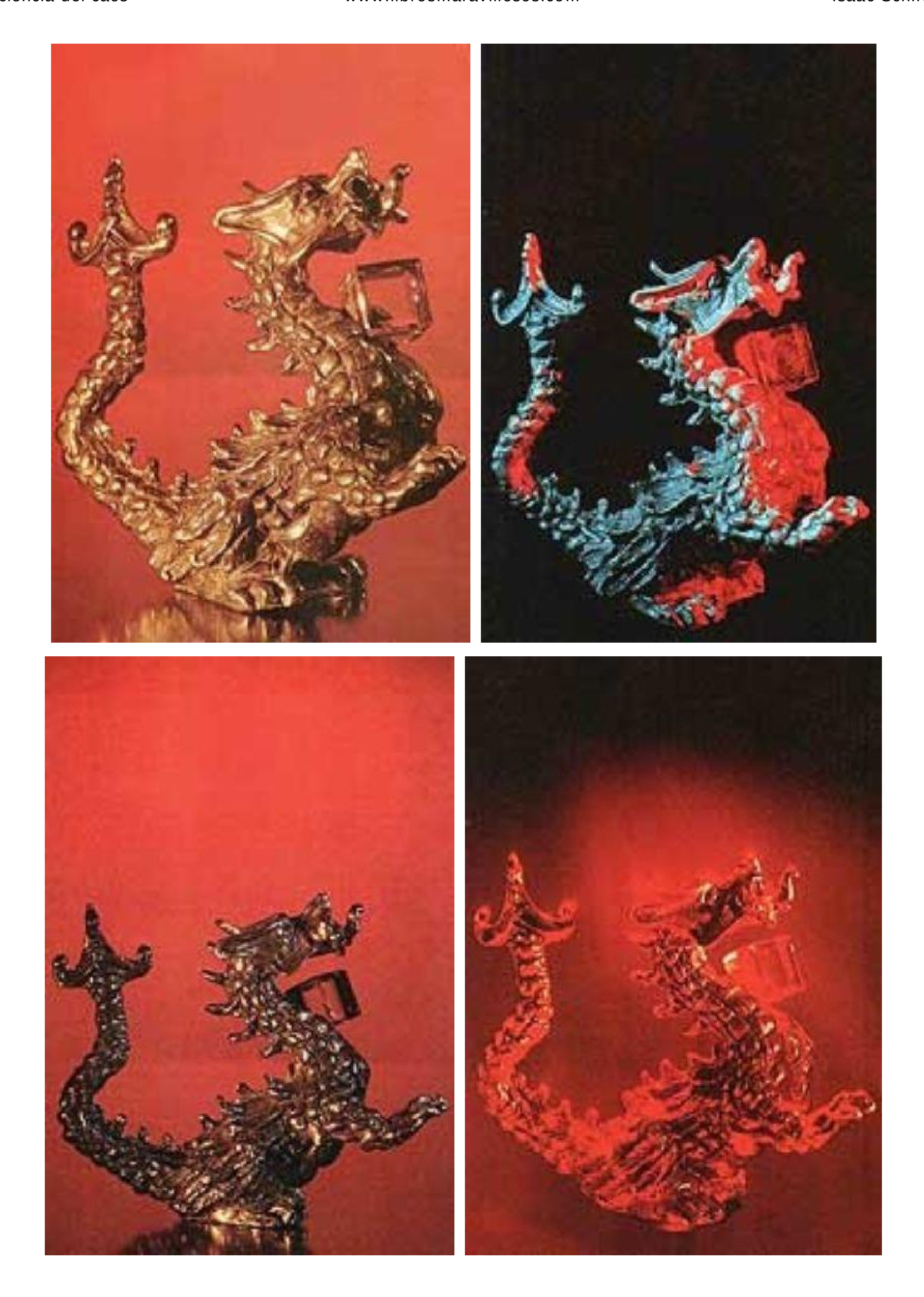
Por lo tanto, una manifestación de la incapacidad de predecir la dinámica de un sistema caótico es que su evolución en el tiempo es computacionalmente irreducible. La manera más rápida de saber cómo prosigue la dinámica de un sistema caótico es observando su evolución.

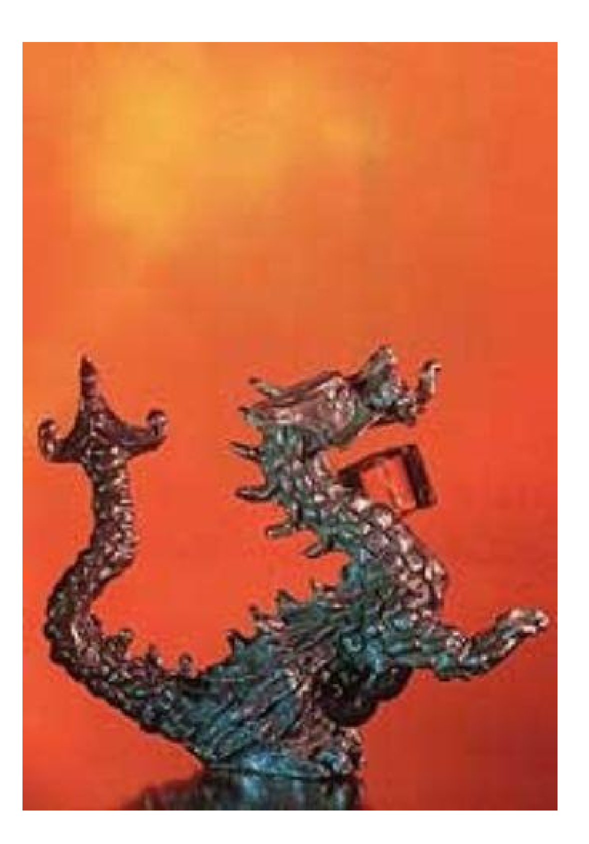
Veámoslo de esta manera: supongamos que se realiza la simulación mediante una serie de números binarios de la evolución del sistema de Lorenz. Un científico intentará explicar estas observaciones por medio de una teoría que puede verse como el algoritmo capaz de generar la serie de resultados y extenderla, es decir, predecir las observaciones futuras. Para una serie dada de observaciones siempre existirán otras teorías que compiten entre sí y el científico tendrá que escoger entre ellas. El modelo que se escoja tendrá la menor cantidad de bits. Entre más pequeño es el programa, más se comprende el fenómeno que se estudia. El hecho es que los resultados de la simulación del fenómeno meteorológico no pueden ser predichos, por lo que cabe hacer la reflexión de si existen realmente sistemas azarosos ideales en el mundo de la física clásica o más bien la aparente aleatoriedad que observamos y explotamos en las teorías estadísticas no es otra cosa que el comportamiento caótico de algún sistema dinámico determinista escondido.



El dragón en la mitología mesopotámica se asocia con el caos. La serie de 10 diapositivas[1] que aquí se presenta fue generada y coloreada por el doctor Isaac Schifter. La número 5 representa una alegoría entre el caos y el orden (estructura del acrílico).

[1] Tanto en el archivo en pdf, como en la página web del libro se hace referencia a 10 imágenes. Sin embargo, en uno y otra, solamente se pueden apreciar 9 imágenes. (N. del E. D.)





13. Los diagramas de fases

Volvamos a la figura generada por la computadora de Lorenz, ¿qué es lo que representa? Para entenderla es necesario describir cómo se representa la dinámica de un sistema en forma geométrica. El sistema dinámico está caracterizado por dos elementos: un *estado* y una *dinámica*.

El primero representa las variables que lo caracterizan y el segundo es una regla que describe la forma en que el estado evoluciona, por ejemplo con el tiempo, para lo cual los científicos utilizan una construcción en un espacio matemático llamado de *fases*. Veamos cómo se puede representar el movimiento de un péndulo que se balancea suavemente en ausencia de fricción. Si construimos un diagrama de fases en el cual las variables son de posición y velocidad, el vaivén quedará descrito por un punto en el plano. En su eterno ir y venir, el péndulo seguirá una *órbita* o camino en un espacio de fases, en la figura 11 se representa uno en forma bidimensional, la L corresponde a la posición y V a la velocidad. Después de ser lanzado, la oscilación infinita describe una trayectoria que tiene forma de elipse representada periódicamente por el punto representativo.

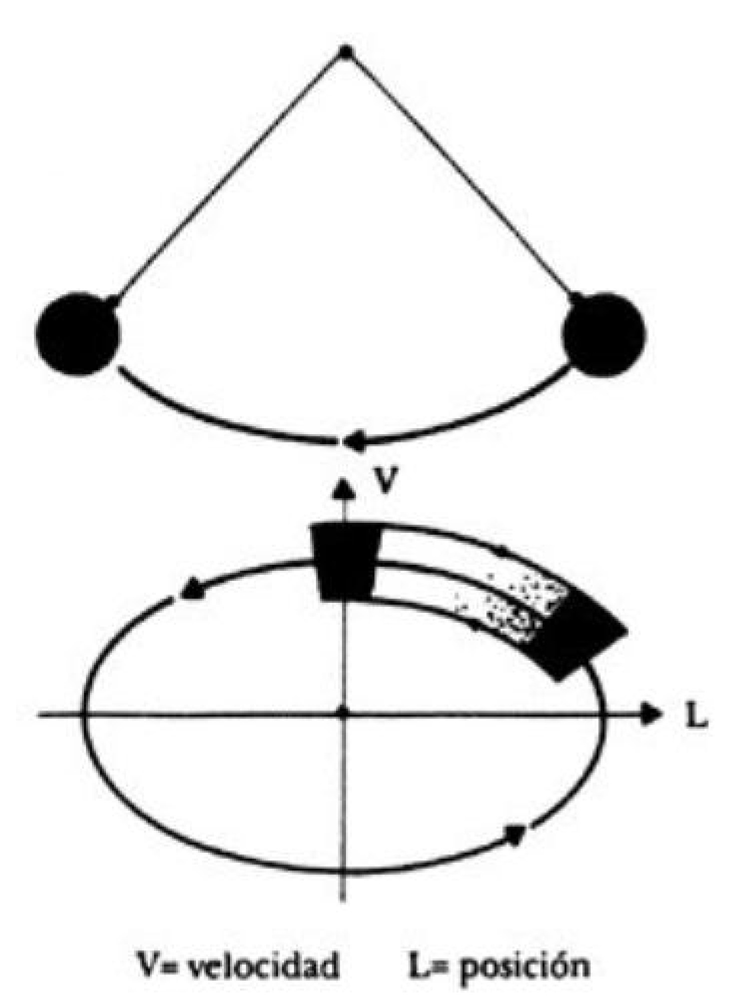


Figura 11. Movimiento de un péndulo sin fricción en el espacio de fases: V = velocidad, L = posición.

Después de cierto tiempo, el conjunto de puntos iniciales contenidos en el cuadrado señalado en la figura se vuelve a encontrar dentro de otro cuadrado de área idéntica al primero. Ahora supongamos que el péndulo oscila experimentando una resistencia a su movimiento, por ejemplo, la que ocasiona la fricción de sus partes con el aire. Esto produce que al cabo de un tiempo pierda su impulso y termine por detenerse; en el espacio de fases la dinámica quedará descrita por una espiral, la cual se va contrayendo sobre sí misma hasta terminar en un punto fijo, cuando llega al equilibrio. Obsérvese la figura 12, el área que contiene los puntos iniciales se contrae hasta reducirse a un punto. Hasta la aparición de las máquinas de cuarzo, los relojeros habían empleado al péndulo como referencia del tiempo. Dado

que no se puede eliminar completamente la fricción, se debe proporcionar al balancín cierta energía para mantener su movimiento, por ejemplo mediante pesas.

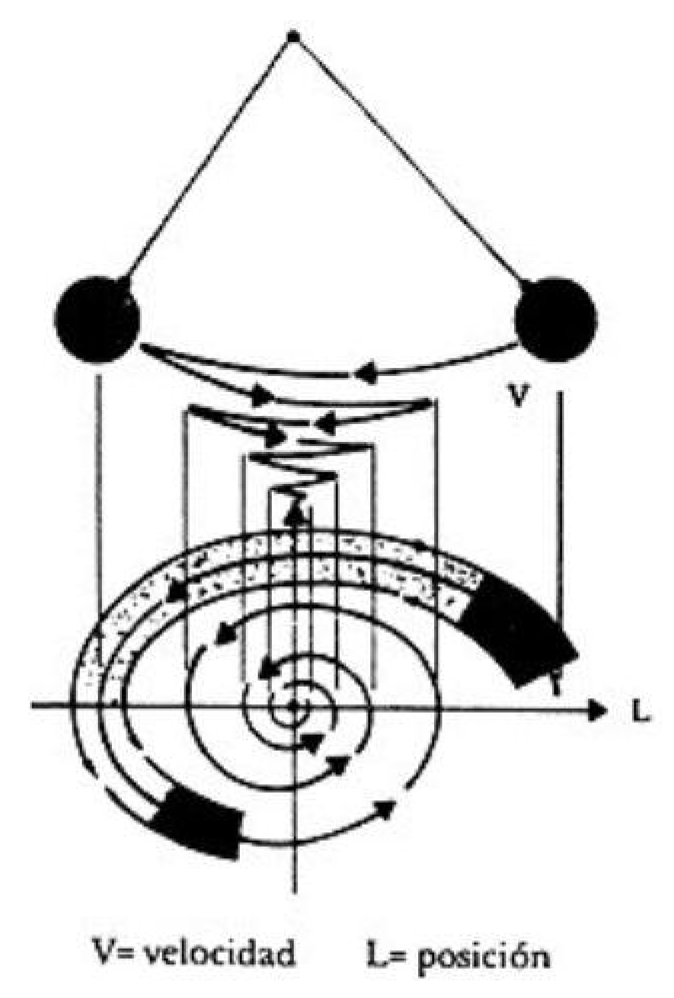


Figura 12. Movimiento de un péndulo con fricción en el espacio de fases. V = velocidad, L = posición.

El movimiento de ese balancín corresponde también a una trayectoria elíptica en el espacio de fases, pero diferente a la del ejemplo anterior: sin importar el impulso que se le dé al inicio, el balancín, al cabo de un lapso realizará un movimiento que siempre tiene la misma velocidad y amplitud. En el espacio de fases, una trayectoria que se inicia del interior o del exterior de la elipse terminará por acercarse a ella y confundirse. Dicha elipse se llama de *ciclo límite* y es también un atractor. Resumiendo, los dos tipos de atractores se caracterizan por tener órbitas o trayectorias que no se repiten exactamente en el tiempo, pero que se mantienen

muy próximas unas de las otras, llegando a concurrir en el mismo punto fijo o ciclo límite. En los dos casos, el comportamiento de los sistemas es predecible cuando la amplitud del movimiento es moderada.

Pero el espacio de fases puede tener más de dos dimensiones y en esos casos la dinámica del sistema es mucho más compleja y aparecen los atractores llamados *extraños*.

14. Atractores sorprendentes

El atractor de Lorenz, tal y como se le conoce hoy en día, es el resultado del comportamiento caótico al tratar de modelar el movimiento de una capa de aire en un sistema tridimensional.

Imaginemos por un momento que tenemos la capacidad de observar los atractores a intervalos constantes de *tiempo* (podríamos pensar en intervalos a cierto número de iteraciones de las ecuaciones que describen el sistema). Cuando el atractor tenga un solo periodo, cada vez que analicemos la figura encontraremos un punto que representa el estado del sistema en el mismo sitio de la iteración previa, como el caso del péndulo que oscila sin resistencia a la fricción. Sin embargo, puede suceder que el punto no regrese a su posición original en el espacio de fases, y cada vez que realicemos la observación veremos que «viaja» en forma errática confinado en un espacio de fases, creando una miríada de puntos que reflejan trayectorias; al inicio son muy próximas pero en el curso de las iteraciones se alejan vertiginosamente. Dado que en el espacio de fases las órbitas no pueden distanciarse eternamente, en un determinado momento se pliegan sobre sí mismas, operación que repiten una y otra vez.

¿Cuál es el factor que determina este fenómeno? Con anterioridad se demostró que una de las características esenciales de los fenómenos caóticos es su sensibilidad a las condiciones iniciales; basta una pequeña incertidumbre en la definición de ellas para que el error se magnifique rápidamente con el tiempo y sea imposible prever en dónde se colocarán los puntos en la gráfica. Stephen Smale, matemático de la Universidad de California, demostró gráficamente el proceso dinámico que sucede en los atractores extraños, empleando conceptos de topología. Esta rama de las matemáticas estudia las deformaciones continuas en geometría y las relaciones

entre las teorías de las superficies y el análisis matemático. Vemos en la figura 13 cómo se representa la gestación del atractor extraño. Primero nos procuramos un material estirable y con él trazamos un cuadrado que representa el espacio de fases (figura 13 (A)). Luego estiramos esa figura para obtener un rectángulo (figura 13 (B)), el cual doblamos para generar algo así como una herradura (figura 13 (C)). Hasta aquí lo que hemos hecho es equivalente a realizar una iteración de la ecuación; considérese que ahora dos puntos, inicialmente alejados, son próximos. Procedamos a confinar la herradura en el espacio de fases original (figura 13 (D)) y realicemos una manipulación idéntica a la anterior. Aparecen cuatro pequeños rectángulos (figura 13 (E)), que se irán multiplicando conforme se hagan más iteraciones y todos ellos provienen de órbitas que surgen de estados iniciales totalmente diferentes. Cuando se amplifica cualquier punto de la imagen del atractor de Lorenz (por ejemplo, haciendo cálculos más precisos) veremos que el objeto tiene pequeñas copias de sí mismo, perfectas en cada detalle, de manera que una parte del mismo es semejante al conjunto total a diferentes escalas de amplificación; más claramente dicho es un fractal. Cuando uno clasifica los objetos clásicos de la geometría dentro de una escala de 1 a 3, los puntos quedan incluidos en el primer grupo y su dimensión es cero, las curvas son de dimensión uno, las superficies dos, y los sólidos de dimensión tres. Los fractales, naturalmente, se sitúan en posiciones intermedias; por ejemplo, el atractor de Lorenz se sitúa entre 2 y 3. Dado que el número de valores necesarios para describir el atractor es de tres, el hecho de que la dimensión del atractor sea inferior significa que el sistema no explota todo el espacio teóricamente disponible. Una explicación muy clara de los fractales se encuentra en el libro de E. Braun, *Un movimiento en zigzag* (La Ciencia desde México[2], núm. 13).

[2] Aquí se hace referencia a la colección con el nombre de «La ciencia desde México». Sin embargo el nombre de la colección en la página web desde la cual se obtuvo el libro en formato pdf, es: «La ciencia para todos». Igual ocurre cuando se busca el libro en alguna de las librerías en línea, como por ejemplo Amazon. (N. del E. D.)

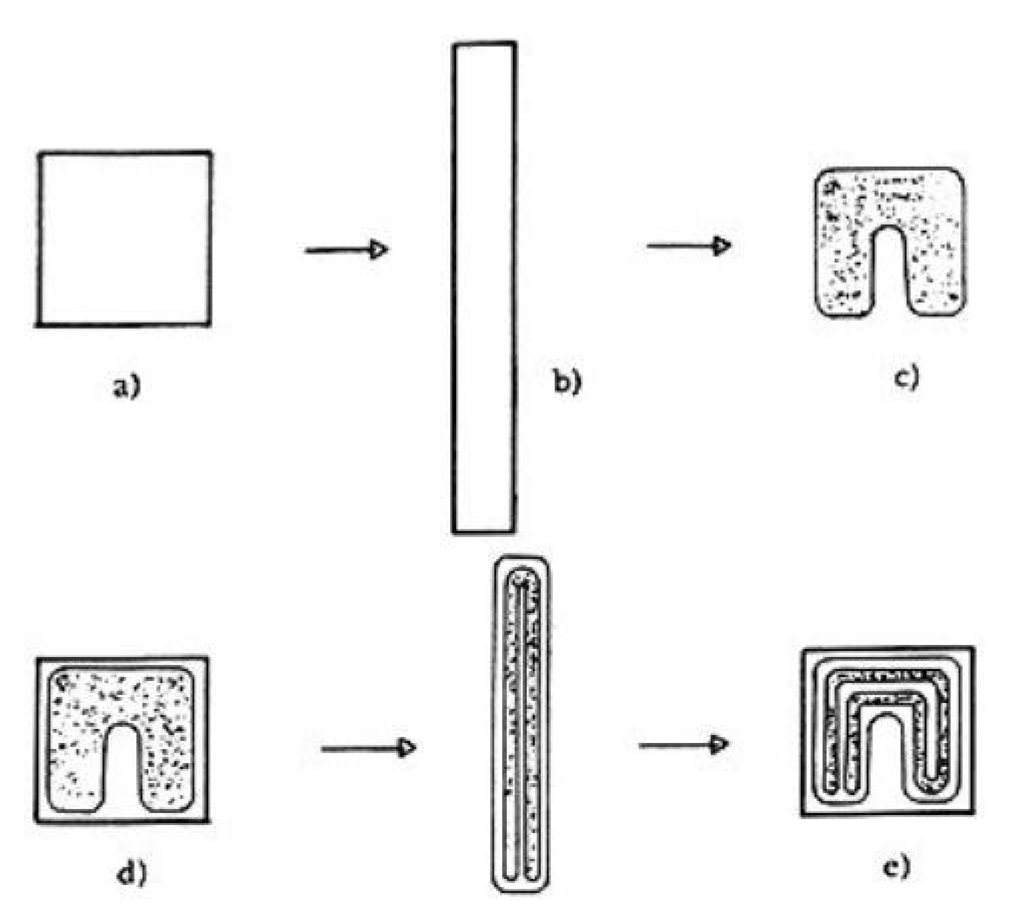


Figura 13. Construcción del mapa de la herradura de Smale para dos iteraciones.

15. La turbulencia

Después de esta excursión por el mundo de las matemáticas y los atractores extraños es conveniente tomar un respiro y relajar la mente, para lo cual invitamos al lector a irse de pesca. El movimiento del agua nos hipnotiza mientras intentamos burlar al pez y atraparlo. Si para observar el curso de las aguas tomamos como referencia la vegetación que viaja por ellas, notamos que en las zonas tranquilas las hojas parecen moverse en línea recta y a la misma velocidad. En cambio, en los rápidos las velocidades son diferentes y si seguimos el movimiento de dos hojas que en un momento viajan próximas, veremos que súbitamente se apartan describiendo trayectorias que no repiten las que vienen atrás. Se dice que en esta última zona el agua es turbulenta. La hidrodinámica se interesa en el comportamiento de los fluidos en movimiento y la turbulencia en particular sigue siendo un problema no del todo resuelto desde el punto de vista teórico, ya que hasta hace no muchos años no había una descripción rigurosa y precisa para el mecanismo por el cual un fluido

pasa de un movimiento ordenado a otro turbulento. El estudio de estos mecanismos tiene un alto valor desde el punto de vista científico y tecnológico; baste recordar que gran parte del transporte que realiza el ser humano es a base de ductos, además de que existen sistemas, como las turbinas o los aviones y barcos, que se mueven en un fluido. ¿Cómo imitar el movimiento de los delfines que se desplazan retardando al máximo la formación de la turbulencia? Algo tiene que ver la compleja estructura de su dermis y epidermis y cuando podamos imitarla seguramente economizaremos grandes cantidades de energía que gastamos en la propulsión de barcos y submarinos. Pero éste no es el único campo que se beneficiaría con el conocimiento más detallado de la turbulencia; como el cuerpo humano posee una vasta red de ductos por los cuales circula la sangre, el conocimiento de las pautas de movimiento sin duda aclararía muchos de los problemas circulatorios que se presentan.

Según nos cuenta E. Braun en su libro *Un movimiento en zigzag*, el botánico Robert Brown había realizado una descripción muy parecida en 1827, al observar al microscopio una suspensión de polen en agua. A cualquier escala de tiempo, por pequeña que fuese, la partícula cambiaba constantemente de dirección y de velocidad. Después de los trabajos de Maxwell, y sobre todo los de Einstein y Perrin, realizados medio siglo después, se hizo claro que el movimiento browniano no era sino el efecto visible que resultaba del choque de las moléculas de agua con la partícula de polen. Según el modelo que se desarrolló, después de cada colisión se pierde la información sobre las velocidades adquiridas en el choque previo, por tanto ya no son correlacionables la velocidad y la posición entre sí, y sólo es posible conocer una distribución promedio de velocidades.

En el caso de la turbulencia su descripción también es estadística, ya que es imposible predecir la velocidad exacta de un fluido en un punto dado. Más aún, lo único que puede uno predecir es la probabilidad de que la velocidad tenga cierto valor, aunque esto también tiene dificultades ya que se sabe que las velocidades fluctúan cuando el movimiento es turbulento, pero no se conoce con precisión cuál es la ley de probabilidad que hay que aplicar.

Pero vayamos del orden al desorden y primero describamos aquel flujo de fluido que no es turbulento. Supongamos que tenemos un líquido viscoso que queremos

desplazar por un tubo; la viscosidad, entendida como el rozamiento interno del fluido, hace necesario que ejerzamos una fuerza para obligar a la capa líquida a deslizarse sobre otra. Si la velocidad no es muy elevada, el movimiento del líquido será *laminar*, en cuyo caso imaginamos que todas las moléculas del fluido se mueven como los coches en una autopista de múltiples carriles de acuerdo con las siguientes reglas: a) cada coche sigue el mismo camino que sus predecesores; y b) dos coches vecinos que estén en el mismo carril o en uno diferente, conforme pasa el tiempo se separan lentamente uno de otro, en forma proporcional a la diferencia de velocidades, esto es, linealmente. Sin embargo, cuando el fluido es sacudido por alguna fuerza externa y la velocidad excede un valor crítico, la naturaleza del movimiento es impredecible, aparecen torbellinos que originan un aumento a la resistencia al movimiento. Esa transición entre los dos estados tiene causas que no son conocidas aun cuando sabemos empíricamente cuáles son los factores que determinan si el régimen de un fluido será laminar o no. ¿Cómo estudiar experimentalmente la turbulencia sin introducir en el sistema dispositivos que perturben la observación? La estrategia es sencilla y se basa en poner en movimiento el fluido mediante la convección térmica. En términos menos técnicos, consiste en crear una diferencia de temperatura en un material que se expande, lo que provoca el movimiento del mismo. Este experimento lo realizó el francés Henri Bénard en 1900, encontrando resultados verdaderamente interesantes.

16. Las células de Bérnard

Henri Bénard fue uno de los científicos pioneros en el campo de la hidrodinámica. Empleando el principio de la convección se propuso estudiar el movimiento de líquidos viscosos, para lo cual diseñó un sistema en el que calentaba un recipiente por abajo en forma controlada mediante placas perpendiculares al eje gravitacional. En la figura 14 mostramos el equipo experimental que Bénard construyó para realizar sus observaciones; se trata de un cilindro perfectamente aislado para evitar la pérdida de calor por las paredes laterales. Al calentar las placas mediante vapor de agua, entre la parte inferior del recipiente y la superior se establecía una diferencia de temperatura que se mantenía constante. En esas condiciones el calor genera una expansión del líquido, provocando que el fluido más caliente tenga una

densidad menor, por lo que tenderá a subir mientras el superficial hará lo contrario. En el experimento original, Bénard empleó una capa delgada de aceite de ballena, quedando la superficie superior en contacto con el aire. Para estudiar la convección utilizó como detector «un corpúsculo sólido, de densidad igual a la del líquido, el cual tiene el mismo movimiento de la partícula líquida que reemplaza, a condición de que el grano tenga dimensiones despreciables»: en este caso fueron granos de licopodio. Tomando placas fotográficas en distintos momentos observó que bajo condiciones de calentamiento precisas el líquido subía por el centro del recipiente, mientras que el de la superficie descendía por los bordes, tal como se muestra en la figura 15.

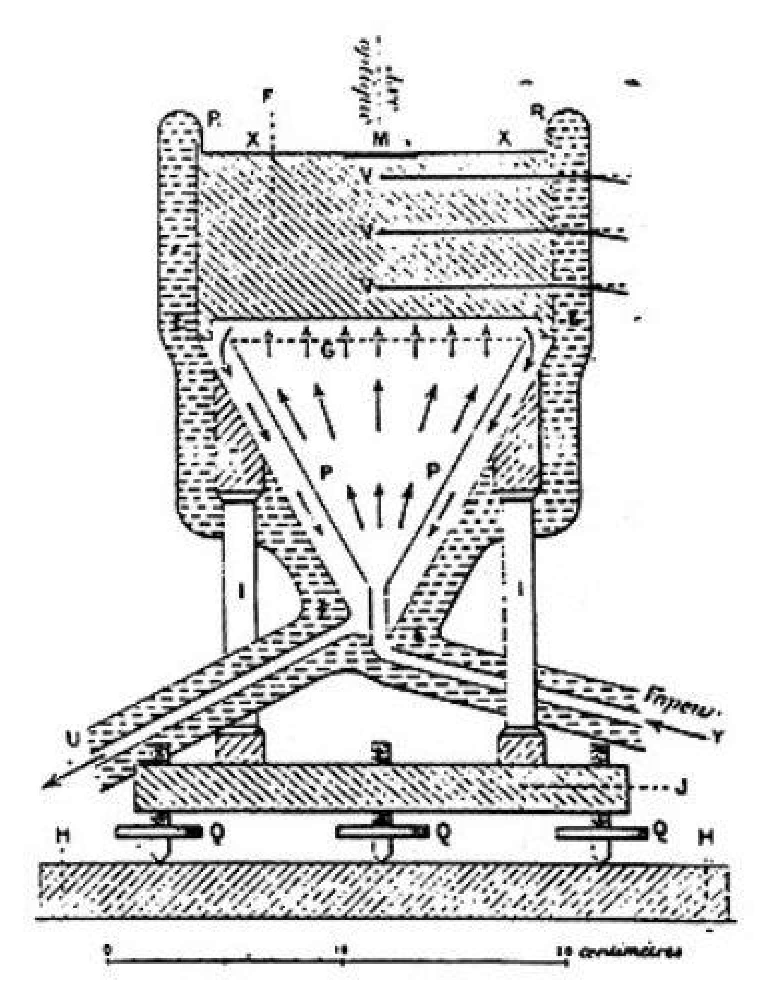


Figura 14. El equipo empleado por Bénard (del dibujo original).



Figura 15. Esquema descrito por Bénard para explicar la formación de las «células».

Como los granos de licopodio son menos densos que el fluido no se sumergen, por lo tanto, cuando Bénard añadió el polvo y esperó cierto tiempo, lo que observó aparece en la figura 16: súbitamente se generan en forma espontánea estructuras hexagonales de ejes verticales, que «es la estructura celular regular. Llamaré en lo subsiguiente *célula* al volumen limitado por uno de esos prismas verticales». Además nos dice: «únicamente por la acción de fuerzas moleculares ordinarias y de la gravitación, una capa líquida muy delgada, inicialmente homogénea, se puede dividir en individuos líquidos, todos iguales, limitados por prismas hexagonales regulares.».

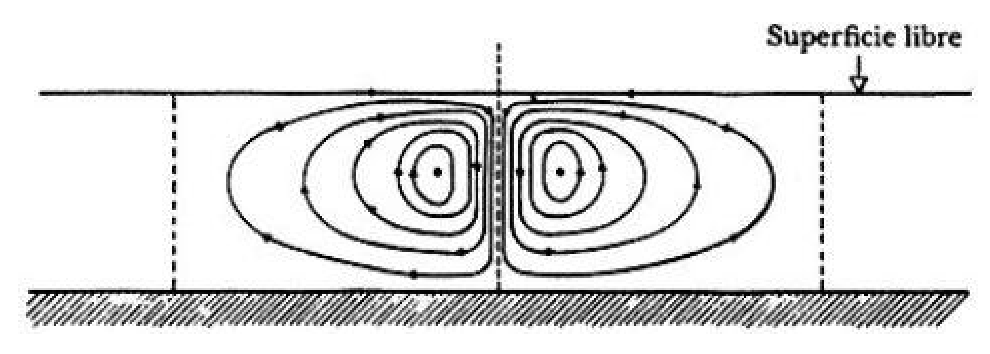


Figura 16. Las células del experimento de Bénard.

Bénard también insiste en el hecho de que la mínima perturbación térmica o mecánica, como podrían ser las corrientes de aire, provoca la ruptura de la formación. Bénard llega a conclusiones interesantes: «En lo que concierne a la posible relación con la estructura de los seres organizados, temo aventurarme sobre un terreno que no me es familiar, si trato de precisar los detalles...».

Bénard sugiere que la división celular podría llevarse a cabo por fenómenos de difusión o de ósmosis que produzcan los mismos efectos que el calor provocó en el caso que él estudió.

17. El helio en convulsión

En años recientes se llevó a cabo un experimento más controlado que el de Bénard, en el cual el fluido empleado fue el helio gaseoso a baja temperatura, es decir a 268 ºC bajo cero. El material estaba dentro de un cilindro vertical, confinado entre dos placas, al cual se calentaba por abajo y se enfriaba por arriba. Durante la experiencia el parámetro que se varió fue el llamado número de Rayleigh (*Ra*), bautizado así en honor de Rayleigh, otro de los notables pioneros en el estudio de la hidrodinámica, que en 1916 publicó sus trabajos y dio una primera interpretación del fenómeno.

El *Ra*, en términos sencillos, es una medida adimensional de la diferencia de temperatura impuesta al sistema, pero depende de otras características del fluido como son la viscosidad, la conductividad térmica, *etc.* Cuando el *Ra* es pequeño se presenta un fenómeno de conducción, es decir, el calor se transmite sin que el fluido se mueva, y mediante termómetros colocados entre la parte inferior y superior se verifica que hay un gradiente de temperatura constante en el tiempo.

Cuando el valor de *Ra* es un poco más elevado, el fenómeno pasa a ser de tipo convectivo y aparecen las células de Bénard. Si se prosigue el calentamiento, el movimiento del fluido no es del todo desordenado; por el contrario, se establece una estructura regular en forma de rodillos (véase la figura 17) en la que es posible observar una sucesión de corrientes que suben y bajan alternadamente, y son casi equidistantes cuando se establece una diferencia de temperatura entre T y T + δT. En la figura se aprecia que la distancia entre dos corrientes verticales adyacentes es del orden de *d*, que es la distancia entre dos placas rígidas horizontales. Debe señalarse asimismo que

si consideramos todo el conjunto de rodillos veremos que cada uno de ellos puede cambiar el sentido de su giro sin que con esto se modifiquen las propiedades geométricas o dinámicas del fluido en movimiento. Esto se debe a que la probabilidad de que gire en un sentido o en el otro es exactamente la misma, como sucede cuando dejamos caer una piedra desde la cima de una montaña, puede rodar por uno u otro lado de la ladera. Si se aumenta el *Ra* aún más, las células se desordenan y aparece el caos, los termómetros marcan temperaturas totalmente aleatorias y el fluido tiene un comportamiento tan errático que pareciera que cada una de sus partes se desplaza en forma independiente. En tal caos aparente, los científicos han podido describir, además de las estructuras de Bénard, otras formaciones curiosas como: a) las llamadas *capas límite*, las cuales son regiones muy delgadas de espesor en donde la velocidad del fluido varia rápidamente; y b) las *plumas térmicas*, especie de hongos parecidos a los que se desarrollan en una explosión nuclear, los cuales son resultado de la existencia de una fuente de calor puntual en el fondo del recipiente.

El fluido caliente sube por el pie del hongo y cuando alcanza el sombrero se extiende antes de volver a descender. Estas formaciones las encontramos en otros contextos, por ejemplo en las turbulencias que se sienten a veces cuando se viaja en avión; se piensa también que la erupción de la lava durante una actividad volcánica sigue el mismo principio.

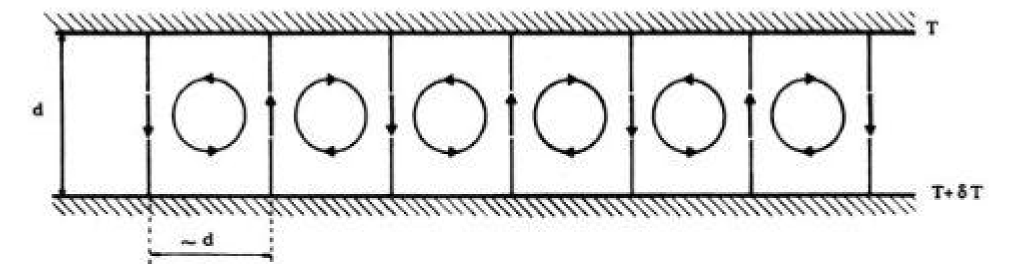


Figura 17. Diagrama de la organización del movimiento de un fluido en convección.

18. El agua también es desordenada

En la Universidad de Chicago, que ha sido sede de los estudios recientes en turbulencias; también se ha trabajado usando como modelo el agua. ¡Cuántas veces la hemos calentado sin percatarnos de la gran complejidad de los movimientos que se generan! Consideramos interesante transcribir la descripción de los autores que realizaron un experimento en un recipiente de unos veinte centímetros de alto, el cual calentaban por abajo y enfriaban por arriba, tal como lo hacía Bénard.

Nos dicen los científicos que el agua gira en sentido inverso a las manecillas de un reloj y que en ciertas regiones del recipiente el líquido se acelera antes de subir rápidamente como un chorro, el cual atraviesa la parte superior y desciende también en forma de chorro hacia el fondo; esto parecería una gran célula de Bénard. Paralelamente, cerca del fondo del recipiente se observan regiones de *capas límite* en donde el líquido está relativamente en calma, ¡pero con una temperatura mayor que el resto!, y a la mínima perturbación emergen las plumas térmicas de estas regiones. Todo este concierto de formas y movimientos, paradoja de la turbulencia, parece llevarse a cabo en zonas independientes. Sigue en pie la pregunta que surge de la turbulencia: ¿cuál es el mecanismo por el cual se origina? La respuesta no es aún contundente y posiblemente pasará mucho tiempo antes de obtenerla; lo que sí podemos decir es que estudios detallados de estos experimentos comprueban que se genera un mecanismo muy semejante al que hemos visto anteriormente con la ecuación logística. La explicación más avanzada hasta la fecha fue dada en 1978 por D. Ruelle y F. Takens en Francia, y es de gran importancia ya que echa por tierra el mecanismo del investigador ruso, Lev Landau que había prevalecido por muchos años. Tal y como vimos en la ecuación caótica,

después de una etapa determinista aparecen bifurcaciones en los valores y la ecuación empieza a oscilar.

De acuerdo con Landau, para que ocurra la turbulencia es necesario que suceda un número muy elevado de bifurcaciones para llegar a ese estado; Ruelle y colaboradores han demostrado que sólo unas cuantas oscilaciones son necesarias para entrar en caos. Más aún, en Italia, V. Fraceschini, mediante un sistema de cinco ecuaciones diferenciales acopladas, adaptó en su computadora las ecuaciones que rigen el movimiento del fluido y encontró que aparecían los atractores de bifurcación periódica conforme los elementos que gobiernan el movimiento se acercaban a los valores que irrumpen en el régimen turbulento. Los cálculos de su simulación indicaron que los números descubiertos por Feigenbaum se comprobaban perfectamente. Por primera vez un modelo matemático de la turbulencia física revelaba una parte de su compleja estructura.

19. Caos y mezclas

«... Con las manos o utilizando un tenedor se desbarata la levadura en harina, agregándole media taza de leche tibia. Cuando estén bien incorporados los ingredientes se amasan un poco, se forma una bola y se deja reposar..., reza la receta para hacer una rosca de reyes, ¡y es precisamente en la mezcla de los componentes que está el secreto de la pasta!». También los químicos necesitan de una buena mezcla para que las reacciones procedan eficientemente, o para dispersar los depósitos que obstaculizan una tubería. Sin importar el proceso de que se trate, la mezcla es una operación compleja y hay que elegir entre fluidos que puedan o no ser totalmente miscibles entre sí, o que fluyan lenta y ordenadamente o rápido y en forma turbulenta. La parte principal en la comprensión de los fenómenos básicos del mezclado se basa en el concepto del «movimiento», una idea que fue desarrollada en el siglo XVIII por el matemático suizo Leonhard Euler. Desde el punto de vista matemático, el movimiento de un fluido es una expresión que nos permite conocer en dónde estará cada partícula del fluido para un tiempo futuro; de esa manera se podrá calcular la fuerza y energía total necesaria para realizar cierta cantidad de mezclado en el sistema. Dada la dificultad que implica poseer dicha información, una manera de conocer el mecanismo por el cual se lleva

a cabo el proceso de mezclado consiste en realizar el estudio en un sistema de dos dimensiones. Al generar un mapa de espacio de fases bidimensional mediante una computadora, el sistema queda restringido en sus movimientos y las partículas adoptan uno de dos comportamientos: o fluyen por el mismo camino creando una corriente (una *órbita*, diríamos si estuviésemos hablando de la ecuación logística) o se quedan estáticas. ¿Cómo hacer para que las corrientes lleguen a un punto común, se separen luego y posteriormente se aproximen de nuevo para volver a mezclarse? La respuesta la sabe intuitivamente quien cocina sin tanta matemática: hay que forzar el flujo para que varíe con el tiempo en una forma periódica de manera que se estire y se pliegue como el atractor de Smale para que parte de la mezcla regrese al punto de origen. Es posible relacionar el estudio del tipo de atractores que se generan con la eficiencia del mezclado. Debemos pensar que el atractor generado es del tipo de ciclo limitado, por ejemplo, y el fluido regresa a su posición original, veremos en la mezcla de dos componentes islas de un material rodeado por el otro, lo cual obstaculiza la homogeneidad del fluido. En la figura 18 se representa una simulación por computadora de cierto número de «partículas» que se mezclan al moverse entre dos cilindros excéntricos que giran periódicamente en sentido opuesto. La computadora calcula el movimiento que se genera en cada giro y en este caso representa 1 000 de ellos; como se ve, la mezcla es bastante homogénea aunque todavía hay un par de *islas* de material que no se ha mezclado. J. Ottino y K. Leong de la Universidad de Massachusetts, EUA obtuvieron las imágenes de la figura

19 como resultado de un experimento de laboratorio; en ellas se demuestran con claridad el proceso de deformación y plegamiento descrito por Smale. En este caso se trata de un material fluorescente, el cual deposita en la superficie de la glicerina un producto viscoso, que se encuentra en una cavidad rectangular. La parte superior e inferior de la cámara se mueven independientemente y en este caso en forma periódica, pero discontinua. Se observa que conforme aumenta el número de periodos aparece el mecanismo de deformación y plegamiento, que conduce al mezclado caótico necesario para obtener un material final homogéneo.

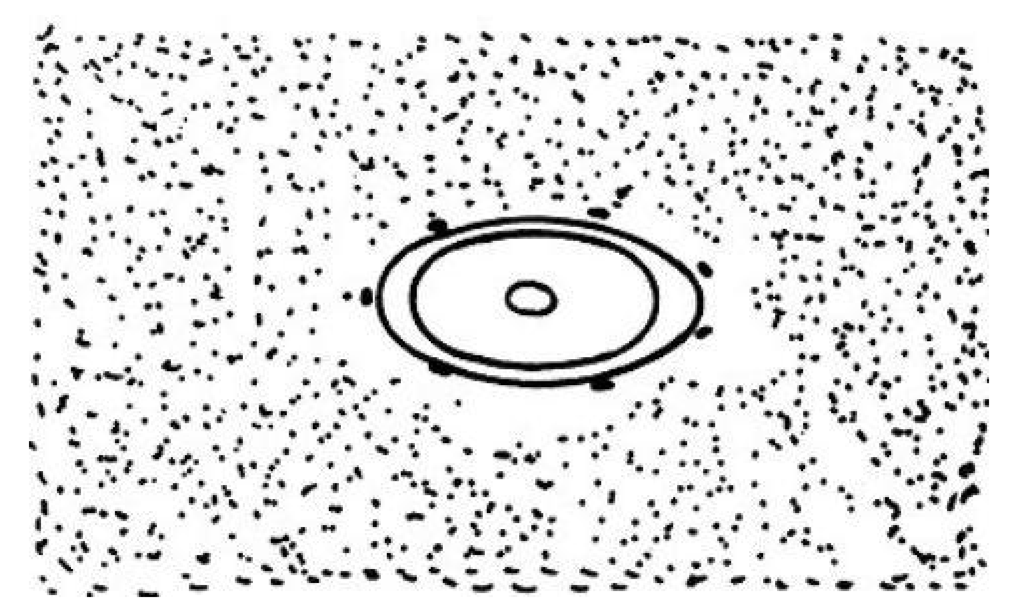
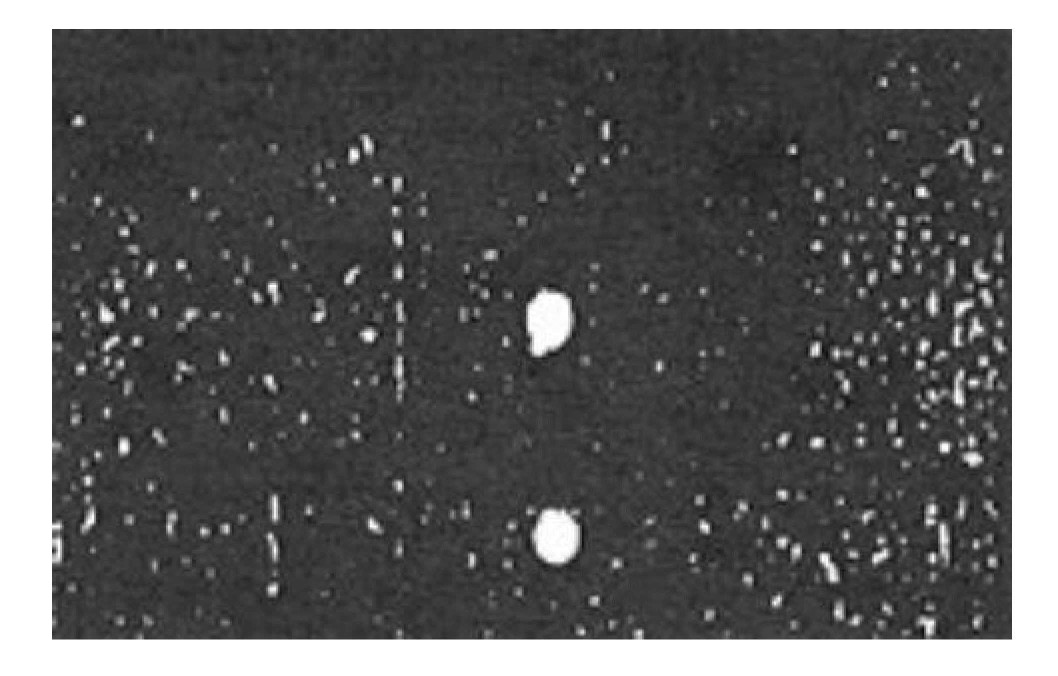


Figura 18. Simulación computacional de una mezcla de «partículas», en donde aún aparecen zonas.



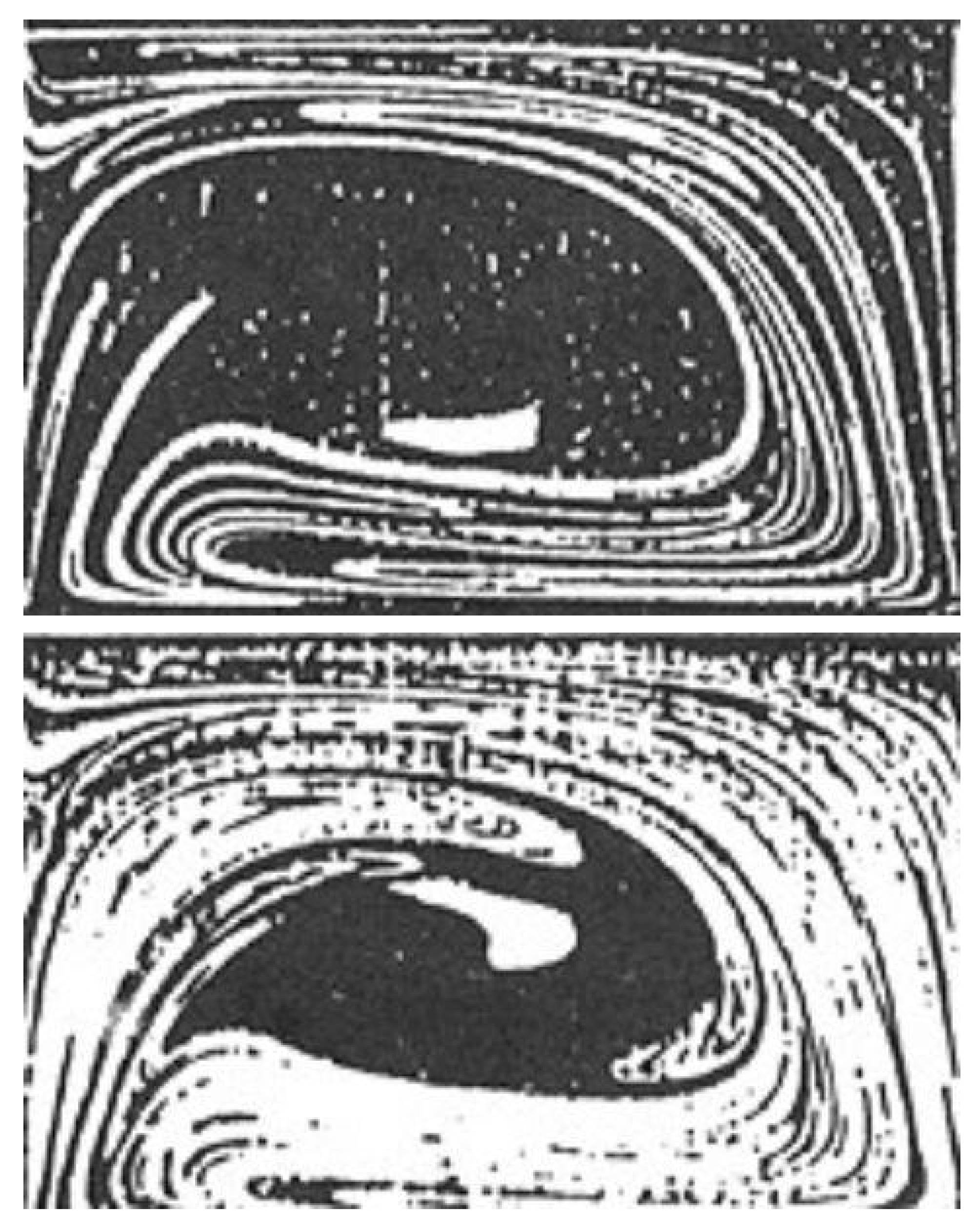


Figura 19. Secuencia de deformación y plegamiento en un experimento mezclado

Capítulo 2
La química del caos

Contenido:

1. *El experimento de W. C. Bray*
2. *La termodinámica*
3. *El movimiento de las reacciones*
4. *Lotka y las oscilaciones*
5. *La extraña reacción que descubrió Belousov*
6. *La reacción B-Z*
7. *¿Qué sucede en la reacción B-Z?*
8. *De la oscilación al caos*
9. *Las reacciones en la fase gaseosa*
10. *Las disoluciones oscilatorias*
11. *Los interruptores químicos*
12. *La catálisis industrial*

1. El experimento de W. C. Bray

EN 1921, W. C. Bray, investigador de la Universidad de California, realizaba un estudio sobre la transformación del agua oxigenada catalizada por diversas sustancias. En particular, el trabajo consistía en evaluar la eficiencia del yodo para promover la mencionada reacción. Recordemos que un catalizador es una sustancia que acelera la velocidad de una transformación química, y que permanece inalterado al final de la misma. Además de ser eficiente para convertir el mayor número de moléculas-reactivo por unidad de tiempo, un catalizador debe poseer otra propiedad muy preciada: la de ser selectivo, es decir, que ante la posibilidad de llevar a cabo la conversión por diferentes rutas, escoge preferentemente una de ellas, lo que orienta la reacción hacia determinado tipo de productos. En presencia de yodo como catalizador, el agua oxigenada se descompone en productos de acuerdo con la siguiente reacción global:

$$10\ H_2O_2 \rightarrow 10\ H_2O + 5\ O_2$$

Es decir, por cada diez moléculas del reactivo se generan otras tantas de agua y adicionalmente cinco de oxígeno. Mediante un dispositivo experimental sencillo, Bray siguió el curso de la reacción en función del tiempo, midiendo la cantidad de yodo que se desprendía de su sistema. La figura 20 nos muestra los resultados de tal ejercicio; el eje vertical representa la concentración de yodo y el horizontal el tiempo, expresado en días. Para asombro de Bray, el proceso seguía un modelo oscilatorio en el cual el yodo aumentaba y disminuía durante la transformación, algo poco usual para una reacción química en aquella época, cuando se esperaría que el trazo que une los diferentes puntos fuese una línea continua. Bray no se amilanó ante las posibles críticas y publicó sus resultados ese mismo año en una prestigiada revista científica, sin que nadie se interesara en ellos. Un par de años después aparecieron dos o tres artículos que daban una explicación «científica» de los hechos: lo que provocaba esas artificiosas oscilaciones seguramente se debía a la falta de precaución de Bray en emplear un reactivo «obviamente» contaminado, o bien, según otros, ¡había partículas de polvo en el medio de reacción! Más de cincuenta años durmió el sueño de los justos la famosa reacción de Bray. Cuando se repitieron los experimentos, que obviamente reprodujeron el modelo oscilatorio, se consideraron como bichos raros dignos de ejecutarse en las prácticas de química en las universidades, para diversión de los estudiantes. ¿Por qué la apatía de los químicos ante los resultados de Bray? En otras áreas de la ciencia, como el caso de la biología, la astronomía o la física, por nombrar algunas, los científicos están acostumbrados a las oscilaciones; pero en la química, quien se atrevía a mencionar las oscilaciones recibía categórica respuesta: «Si eso fuese cierto se estaría violando el segundo principio de la termodinámica, más aún, mi querido colega, eso es el equivalente a diseñar una máquina de movimiento perpetuo.».

Antes de opinar sobre la cordura de nuestro científico, veamos primero qué nos dicen los mencionados principios termodinámicos.

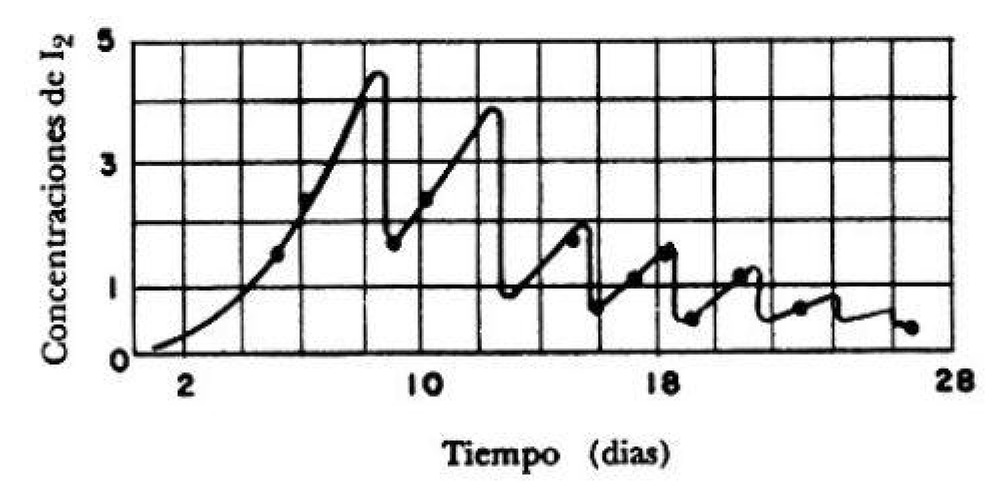


Figura 20. Los resultados de la reacción de Bray.

2. La termodinámica

La primera ley de la termodinámica afirma la conservación de la energía para todos los sistemas.

El incremento de energía en el seno de un sistema es igual a la cantidad de energía que ha recibido. Un sistema macroscópico puede estar constituido por gran número de componentes y separado del mundo exterior por una superficie geométrica ficticia, de manera que el número total de componentes por volumen es constante. Así, por ejemplo, una célula puede considerarse como un sistema que está compuesto por unas diez mil moléculas. En un sistema *aislado* no hay intercambio de materia o energía con el mundo exterior. Un sistema *cerrado* únicamente intercambia energía con el medio externo. Por último, un sistema *abierto* es aquél que intercambia energía y materia con el mundo exterior. La Tierra, en su conjunto, es un sistema cerrado que recibe energía de los rayos solares (despreciando los intercambios másicos que provienen de la caída de meteoritos, por ejemplo). Por el contrario, una célula de una bacteria es un sistema abierto.

Cuando dos objetos están en contacto y a la misma temperatura nunca sucederá que uno de ellos se caliente mientras el otro se enfría. Entonces, si bien la energía no se produce ni se destruye, parece fluir únicamente en una dirección. El segundo principio introduce una nueva función de un sistema, la entropía, que está relacionada con los intercambios de calor con el mundo exterior. Contrariamente a lo que sucede con la energía, la entropía no se conserva.

Siempre que algún proceso natural genera energía, parte de ella no se convierte en formas utilizables. Está ahí, pero no puede ser empleada, es inalcanzable. La cantidad de energía no utilizable es equivalente al aumento de entropía, que es función creciente de la temperatura. Por ejemplo, considérese que a baja temperatura el estado sólido está constituido por un sistema que tiene una estructura ordenada, mientras que si la temperatura es lo suficientemente elevada se presenta el estado gaseoso, de entropía mayor y estructura desordenada.

Para un sistema cerrado homogéneo que se encuentra a temperatura y presión constantes, un cambio químico espontáneo debe, sin duda, estar acompañado de una disminución en la energía disponible o, si se quiere ver de otra manera, por un aumento en la entropía. Por lo tanto, el conjunto tiende hacia un estado permanente e inequívoco, que es el equilibrio termodinámico. Por el contrario, cuando el sistema es abierto puede tender hacia un régimen constante, que no es el del equilibrio, llamado estado *estacionario*. El escepticismo de los químicos de la época ante los resultados de Bray se debía en parte a que pensaban que si la energía libre del sistema disminuía en forma continua, esto debía reflejarse en un aumento o disminución correspondientes de las concentraciones de las especies químicas presentes durante la transformación, es decir, la conversión de A en B debería ser continua, sin que en un momento B regresara para formar A nuevamente. A partir de los años cincuenta se realizó una revisión de los conceptos termodinámicos y entre el grupo de científicos que trabajaron en ello destaca la labor de Ilya Prigogine, químico ruso emigrado a Bélgica. Prigogine aportó las bases teóricas para describir el comportamiento de los sistemas físicos que se encuentran alejados del equilibrio termodinámico, trabajo que le valió ser galardonado con el premio Nobel de Química en 1967. Lo que podemos resumir de estos estudios es que en un sistema bajo esas condiciones se pierde la homogeneidad espacial y temporal que prevalece cerca del equilibrio. Ante esas circunstancias es posible que se presenten oscilaciones en una reacción química, aunque los productos al inicio y al final no estén sujetos a ellas. Un sistema alejado del equilibrio tiene, como veremos, un comportamiento impredecible, caótico para ser claros, pero en esas condiciones el desorden máximo deja de ser la regla y nada prohíbe también la emergencia de un orden temporal o espacial. Las células de Bénard son un ejemplo

del orden espacial en el cual el sistema, de estar en el equilibrio, debería presentar una temperatura uniforme en el recipiente, pero sucede que cuando la diferencia de temperatura alcanza cierto valor, aparecen continuamente pequeñas corrientes de convección, como pulsos que regresan a su estado inicial, y a partir de un punto crítico ciertas pulsaciones se amplifican y dan lugar al movimiento macroscópico que origina la estructura ordenada en forma de células hexagonales.

3. El movimiento de las reacciones

¿Cómo se representa la evolución temporal de una reacción química? En un principio, la química estudió las propiedades de las sustancias, luego las de su composición, pasó después a las leyes que determinan las propiedades y estructuras, hasta finalmente llegar al estudio de las leyes de la transformación química. Podemos decir, en términos generales, que primero existió la química *descriptiva*, luego la *estructural* seguida de la *termodinámica*, para llegar por último a la *química cinética*, es decir, el estudio de las velocidades de reacción. La química descriptiva y la estructural se especializan en el estado de la materia, la «fotografían»; mientras la termodinámica considera los cambios de la materia, estado a estado, o sea, «compara las fotografías», la cinética estudia el paso de un estado al otro, «filma» el evento. La cinética toma en consideración el camino que sigue la transformación, y la velocidad de una reacción depende obviamente del camino que sigue. La interpretación cuantitativa de los resultados de una reacción química se basa en la construcción y análisis subsecuente de un modelo por el cual los reactivos llegan a los productos finales, y especifica, si es posible, todas las especies intermediarias que intervienen.

Así, por ejemplo, en el caso de la reacción de Bray la velocidad de la desaparición del agua oxigenada se puede definir como:

$$v = k\,(A) \qquad \text{(ecuación 4)}$$

en donde v representa la velocidad de desaparición del reactivo, expresada por ejemplo en número de gramos por unidad de tiempo, k es una constante que depende de la temperatura y (A) representa la concentración del reactivo en un

tiempo dado. Suele suceder que el mecanismo o modelo por el cual la reacción pasa del reactivo inicial a los productos sea más complejo que como lo describimos con anterioridad. Por lo común, la molécula de agua oxigenada no genera directamente en un solo paso los productos de reacción, sino que en el curso de la transformación aparecen y desaparecen especies intermedias de vida muy corta que pueden ser detectadas con los dispositivos de medición que utilicemos. La ecuación anterior sólo nos describe la velocidad de transformación global que se deriva de combinar todas las reacciones intermedias que son teóricamente posibles. Si analizamos un poco más a fondo la reacción de Bray, encontraremos que suceden estas transformaciones intermedias:

$$a)\ 5\ H_2O_2 + I_2 \rightarrow 2\ HIO_3 + 4\ H_2O$$
$$b)\ 5\ H_2O_2 + 2\ HIO_3 \rightarrow 5\ O_2 + I_2 + 6\ H_2O$$

Sumemos todos los componentes que están a la derecha de las flechas y hagamos otro tanto con los que están a la izquierda:

$$10\ H_2O_2 + I_2 + 2\ HIO_3 \rightarrow 5O_2 + 2\ HIO_3 + I_2 + 10\ H_2O$$

Al hacer la resta entre los componentes comunes a ambos lados de la ecuación, llegamos a la ecuación original que habíamos descrito anteriormente. En nuestro conocido diagrama de fases podemos describir la dinámica de un sistema mediante un esquema el que se representa en la figura 21 para una reacción teórica en la que un compuesto A reacciona con otro B para dar un producto final. En el diagrama se grafica cada una de las masas de los dos reactivos y el tercer eje representa el tiempo. Los reactivos parten de cierta concentración inicial y evolucionan hasta alcanzar un equilibrio en el cual su concentración ya no cambia en el tiempo. Como podemos observar, en este esquema sencillo existe un atractor de punto fijo.

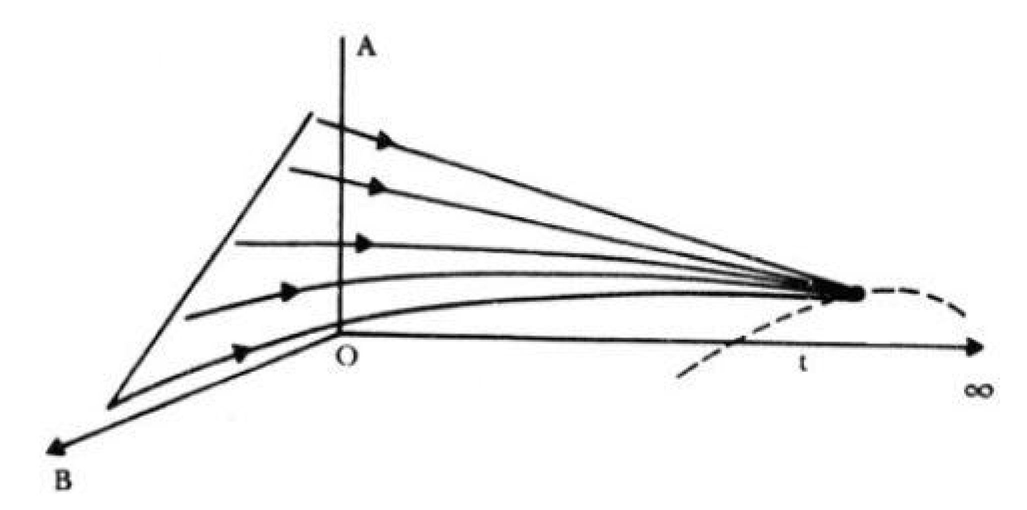


Figura 21. Evolución de las concentraciones de reactivos en el tiempo hacia un punto de equilibrio.

4. Lotka y las oscilaciones

¿Cómo explicar desde el punto de vista cinético una reacción oscilatoria? Existía un modelo teórico que daba cuenta de este tipo de comportamiento y había sido descrito por Alfred Lotka en 1920 para explicar las oscilaciones que suceden en problemas de tipo ecológico. El mecanismo propuesto consiste en tres «reacciones», de las cuales dos de ellas son autocatalíticas:

(P)+C —› 2C
C+L —› 2L
L —›

Aquí (P) representa el pasto del cual se alimentan los conejos, es decir, C. Dado que el pasto está en una concentración muy elevada podemos tomarlo como un valor constante que no interviene en el mecanismo. Al alimentarse de pasto los conejos se reproducen, lo cual representa la primera reacción autocatalítica dado que los conejos aceleran su propia creación. La segunda reacción autocatalítica la representan los lobos, L, que crecen y se reproducen a expensas de los conejos, con lo cual la población de conejos disminuye. Eventualmente los lobos mueren, y los conejos vuelven a elevar su población. En la figura 22 se presenta una solución a este ciclo, utilizando un conjunto de tres ecuaciones diferenciales que se realizaron

en computadora. En la figura 22 (a) se grafica la concentración de C o de L en función del tiempo y en la figura 22 (b), la concentración de uno en función del otro. En este último caso lo que se obtiene es una curva cerrada, casi una elipse; por tanto, conforme el sistema sigue la curva, las concentraciones de C o L varían de una manera periódica. Hasta principios de los años sesenta los químicos no conocían un sistema real que se comportara de acuerdo con el esquema de Lotka; obviamente la reacción de Bray había sido olvidada pero los estudios de Prigogine demostraban que dicho tipo de oscilaciones eran posibles. La evidencia experimental que faltaba la había realizado B. P. Belousov en 1958, un químico ruso.

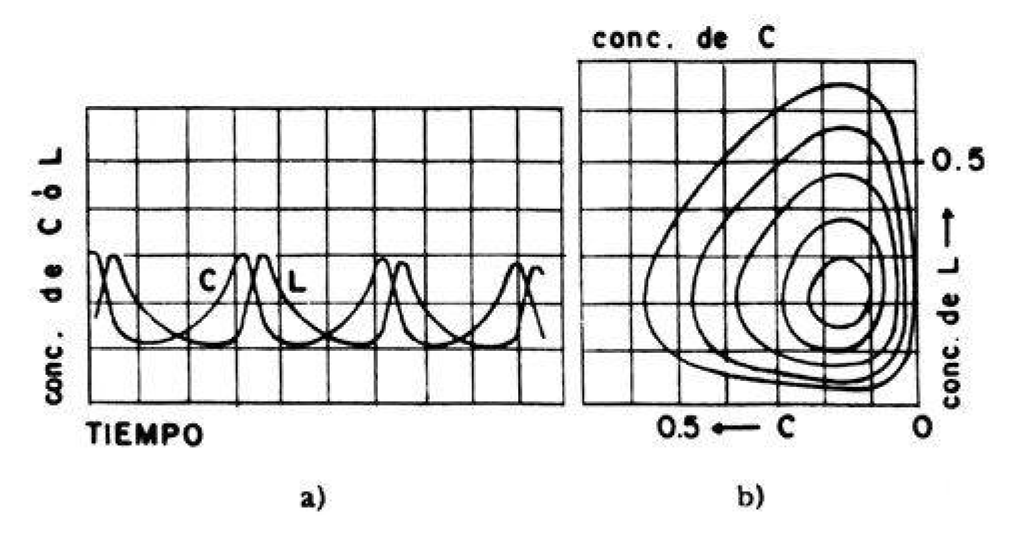


Figura 22. Simulación del mecanismo de Lotka: a) cinética típica; b) trayectoria de fases.

5. La extraña reacción que descubrió Belousov

En 1959 B. P. Belousov; biofísico que trabajaba en el Ministerio de Salud de su país, en un congreso de medicina informó de un dato peculiar que había observado en el curso de una reacción química que estaba estudiando. Como en el caso de la reacción de Bray, este dato fue olvidado durante algún tiempo hasta que los trabajos de Prigogine se dieron a conocer.

La historia es sencilla: el científico estudiaba en su laboratorio una reacción de oxidación de un compuesto orgánico, el ácido cítrico, el cual se trata con una sal de bromo y la conversión se cataliza por acción de una sal de cerio que sirve para aumentar la velocidad de la transformación.

El cerio en solución acuosa inicialmente tiñe el líquido de color amarillo y una vez que cataliza la reacción se vuelve incoloro. Como es de esperarse en una reacción clásica, una vez que se lleva a cabo la transformación, la solución originalmente amarilla debía quedar incolora. Para asombro de Belousov, la solución perdía la coloración amarilla, mas para recobrarla al poco rato, y dichas oscilaciones se observaban por mucho tiempo; o sea que el cerio que se había transformado volvía al punto de partida. Años más tarde, otro biofísico ruso, A. M. Shabotinsky se interesó en esta curiosa reacción y la estudió más sistemáticamente, realizando varias modificaciones al sistema: cambió el ácido cítrico por el ácido malónico y añadió un compuesto de hierro que permitía observar en forma más clara las etapas de oxidación y reducción que se llevaban a cabo.

6. La reacción B-Z

Resumamos los ingredientes de la reacción, ahora conocida como reacción de Belousov- Shabotinsky:

- *ácido malónico,*
- *ácido inorgánico, que puede ser el sulfúrico,*
- *una sal que aporte iones bromato (BrO_3–),*
- *una sal que aporte iones bromuro (Br–),*
- *una sal de hierro (Fe^{++}),*
- *una solución acuosa.*

Precisemos que un ion es un átomo o grupo de átomos cargados eléctricamente y que sus cargas son el resultado de la ganancia o pérdida de uno o más electrones. Cuando un ion se oxida pierde electrones y cuando se reduce los gana. Así, los iones de hierro en el estado reducido (Fe^{++}) dan una coloración roja, y al oxidarse se convierten en Fe^{+++}, de coloración azul. Obviamente, una sustancia que se reduce trae aparejado el hecho de que otra se oxide. Las modificaciones que hizo Shabotinsky en la reacción permitieron observar que además de las oscilaciones temporales se presentaban estructuras espaciales en el seno de la reacción inicialmente homogénea, las cuales se prolongaban durante mucho tiempo. Obviamente, si uno espera el tiempo suficiente para que se alcance el equilibrio

dictado por las leyes de la termodinámica, lo que encontrará en el recipiente es bióxido de carbono, agua y el ion bromuro:

$$3\ CH_2.\ (COOH)_2 \rightarrow 9C0_2 + 6H_20 + 4Br$$

ácido malónico

Pero las curiosas oscilaciones no son el producto de la reacción global, sino de las transformaciones intermedias que ocurren. Cuando la reacción se realiza en una caja cilíndrica a temperatura ambiente, en el inicio es roja; súbitamente, parte de esta solución se vuelve azul y comienza a diseminarse por toda la caja, formando un disco. Dado que la reacción es oscilatoria, el centro del disco azul vuelve a ser rojo otra vez y éste se convierte en un anillo. Conforme las oscilaciones continúan, el centro del anillo torna otra vez al color azul, lo cual formará otra vez un disco que se convertirá en anillo. Se tiene por lo tanto un modelo de anillos concéntricos que se propagan. Las ondas de color representan las variaciones en la concentración de especies químicas que se propagan en un sistema inicialmente homogéneo. Es decir, estamos en presencia de una inestabilidad como la de Bénard, salvo que en este caso las oscilaciones son espaciales y temporales a la vez. Algunos autores afirman que las ondas se propagan con velocidades de 6 mm/minuto y emergen a intervalos más o menos iguales de veinte lugares distintos de la caja cilíndrica que en su mayoría no son puntos, sino arcos de curvas de hasta 15 mm de largo.

En la figura 23 se muestra el tipo de disco que se forma en la reacción de Belousov-Shabotinsky.



Figura 23. Los anillos de la reacción B-Z.

7. ¿Qué sucede en la reacción B-Z?

¿Cuál es el mecanismo que se ha propuesto para esta reacción? Armar el rompecabezas de esta reacción no ha sido tarea fácil; para ello han intervenido cientos de investigadores en el mundo, quienes aportaron datos cuantitativos sobre las diferentes etapas elementales de la misma. De este trabajo monumental hoy en día se ha establecido una secuencia ni más ni menos que de 18 reacciones elementales, en las que intervienen 21 especies químicas diferentes, las cuales se presentan en la figura 24. Tratemos de dar una descripción cualitativa de este fenómeno, para esto nos apoyaremos en la figura 25, en la cual sólo se describe parte de las reacciones que intervienen utilizando en este caso al cerio (Ce) como catalizador en lugar del hierro.

Si recordamos el diagrama de Lotka, una característica del sistema era que existía una reacción autocatalítica, es decir, que una sustancia acelera su propia creación. En la reacción de B-Z existe tal tipo de fenómeno: la especie $HBrO_2$ se genera en R_5 y aumenta su cantidad en R_6.

El $HBrO_2$ se consume en la R_2 y en la R_5 y cuando la primera reacción domina sobre la segunda, la producción autocatalítica se apaga y las reacciones que predominan son R_1, R_2, R_3, R_{8a} y R_{8b}, que consumen la especie Br^- que hacía que R_2 fuese predominante sobre R_5. Al dejar de predominar se «enciende» el sistema R_5 y el R_6, que oxidan al catalizador Ce^{+3} a Ce^{+4} y se produce el cambio de coloración de la solución.

Cuando las reacciones R_5 y R_6 están funcionando promueven las reacciones R_9 y R_{10}; esta última dará los productos finales de la reacción, pero a su vez genera nuevamente Br–, que vuelve a hacer que R_2 domine a R_5 y recomience el ciclo.

Es obvio que en un sistema cerrado en el cual no se alimentan reactivos la reacción tenderá a un equilibrio al irse consumiendo el ácido malónico y el ácido bromomalónico, que se convierten en bióxido de carbono. Por lo tanto, el siguiente paso era alejar la reacción del equilibrio termodinámico y estudiar en forma más cuantitativa la evolución de las especies intermedias, dejando a un lado los cambios de coloración.

$$2H^+ + Br^- + BrO_3^- \rightleftharpoons HOBr + HBrO_2$$
$$H^+ + HBrO_2 + Br^- \rightleftharpoons 2HOBr$$
$$HOBr + Br^- + H^+ \rightleftharpoons Br_2 + H_2O$$
$$CH_2(COOH)_2 \rightleftharpoons (OH)_2C{=}CHCOOH$$
$$Br_2 + (OH)_2C{=}CHCOOH \rightleftharpoons H^+ + Br^- + BrCH(COOH)_2$$
$$HBrO_2 + BrO_3^- + H^+ \rightleftharpoons 2BrO_2 + H_2O$$
$$BrO_2 + Ce^{3+} + H^+ \rightleftharpoons Ce^{4+} + HBrO_2$$
$$Ce^{4+} + BrO_2 + H_2O = BrO_3^- + 2H^+ + Ce^{3+}$$
$$2HBrO_2 = HOBr + BrO_3^- + H^+$$
$$Ce^{4+} + CH_2(COOH)_2 \rightleftharpoons CH(COOH)_2 + Ce^{3+} + H^+$$
$$CH(COOH)_2 + BrCH(COOH)_2 + H_2O = Br^- + CH_2(COOH)_2 + HOC(COOH)_2 + H^+$$
$$Ce^{4+} + BrCH(COOH)_2 + H_2O \rightleftharpoons Br^- + HOC(COOH)_2 + Ce^{3+} + 2H^+$$
$$2HOC(COOH)_2 \rightleftharpoons HOCH(COOH)_2 + O{=}CHCOOH + CO_2$$
$$Ce^{4+} + HOCH(COOH)_2 \rightleftharpoons HOC(COOH)_2 + Ce^{3+} + H^+$$
$$Ce^{4+} + O{=}CHCOOH \rightleftharpoons O{=}CCOOH + Ce^{3+} + H^+$$
$$2O{=}CCOOH + H_2O \rightleftharpoons O{=}CHCOOH + HCOOH + CO_2$$
$$Br_2 + HCOOH \rightarrow 2Br^- + CO_2 + 2H^+$$
$$2CH(COOH)_2 + H_2O \rightleftharpoons CH_2(COOH)_2 + HOCH(COOH)_2$$

$$HOBr + Br^- + H^+ \rightleftharpoons Br_2 + H_2O \qquad (R1)$$
$$HBrO_2 + Br^- + H^+ \rightarrow 2HOBr \qquad (R2)$$
$$BrO_3^- + Br^- + 2H^+ \rightarrow HBrO_2 + HOBr \qquad (R3)$$
$$2HBrO_2 \rightarrow BrO_3^- + HOBr + H^+ \qquad (R4)$$
$$BrO_3^- + HBrO_2 + H^+ \rightarrow 2BrO_2^{\cdot} + H_2O \qquad (R5)$$
$$BrO_2^{\cdot} + Ce^{3+} + H^+ \rightleftharpoons HBrO_2 + Ce^{4+} \qquad (R6)$$
$$BrO_2^{\cdot} + Ce^{4+} + H_2O \rightarrow BrO_3^- + Ce^{3+} + 2H^+ \qquad (R7)$$
$$CH_2(COOH)_2 + H^+ \rightleftharpoons (OH)_2C(CHCOOH) + H^+ \qquad (R8a)$$
$$(OH)_2C(CHCOOH) + Br_2 \rightarrow BrCH(COOH)_2 + Br^- + H^+ \qquad (R8b)$$
$$6Ce^{4+} + CH_2(COOH)_2 + 2H_2O \rightarrow 6Ce^{3+} + HCOOH + 2CO_2 + 6H^+ \qquad (R9)$$
$$\gamma Ce^{4+} + BrCH(COOH)_2 + 2H_2O \rightarrow Br^- + \gamma Ce^{3+} + \gamma H^+ + [Prod] \qquad (R10)$$

---

8. De la oscilación al caos

La estrategia para alejar la reacción del equilibrio consiste en realizarla en un sistema abierto, es decir, en el que se intercambia materia y energía con el medio circundante. Para ello es necesario modificar el sistema de reacción, para lo cual se alimentará en forma independiente y controlada los reactivos, que llegan a un dispositivo en el cual se mezclan y reaccionan, mientras que paulatinamente se extraen los productos de la transformación. La alimentación continua de reactivos y la extracción simultánea de la mezcla de reacción impiden que el sistema alcance el equilibrio. Además, al alimentar los reactivos en forma independiente es posible modificar las concentraciones individuales de cada uno de los participantes y también, si se varía la velocidad de alimentación al reactor, se altera en forma controlada el tiempo en el cual los reactivos están en contacto entre sí, lo que en el argot de los químicos se suele llamar el *tiempo de residencia* o de *contacto*. El análisis cuantitativo de lo que sucede en el reactor se lleva a cabo introduciendo diminutos electrodos sensibles a la variación de las concentraciones de las especies de cerio en sus estados oxidado y reducido, así como otros que son sensibles a la concentración del ion bromuro. Mediante esta metodología experimental, muy elaborada en su aplicación, es fácil que el lector vea que desde el punto de vista de la reacción química, es posible realizar algo equivalente a lo hecho con la ecuación logística, ya que mediante experimentos con diversas condiciones iniciales, como en el curso de reacción, se obtienen datos sobre la dinámica del sistema.

En la figura 26 presentamos algunos resultados experimentales que se obtuvieron al variar el tiempo de residencia; con un electrodo de platino se midió en forma continua el cambio en el potencial de óxido-reducción de la reacción y con ello se obtuvo una estimación de la relación de iones cerio (III) / (IV). Por lo tanto, en la figura se grafica en el eje horizontal el tiempo de reacción y en el vertical el valor del potencial medido con el electrodo: en el caso de la figura a), el flujo total de reactivos es de un mililitro por minuto, en el caso b) es de 4.0.

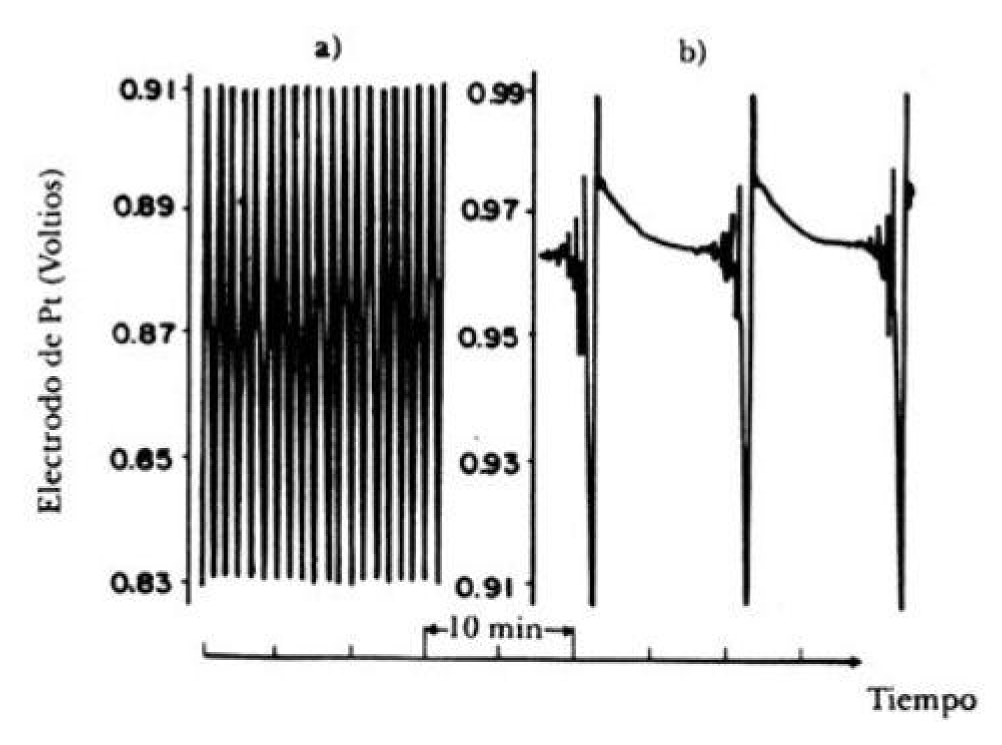


Figura 26. Oscilaciones de la reacción B-Z en función del flujo de reactivos, a) 1 ml/minuto; b) 4.0.

De los resultados experimentales es evidente que para unas condiciones se presentan oscilaciones regulares, mientras que en otras las oscilaciones son mucho más complejas. Los autores de este trabajo, K Graziani, J.Hudson y R. Schmitz de la Universidad de Illinois, EUA, no dudaron de calificarlos como estados caóticos en una publicación aparecida en 1977. Todavía en 1985 muchos científicos dudaban de los resultados experimentales que se habían acumulado en diversos laboratorios en el mundo: «el hecho de que existan sistemas experimentales que exhiban un comportamiento caótico no prueba que el caos es inherente al mecanismo de la reacción, lo más probable es que se deba a fluctuaciones estocásticas, imposibles de evitar», decían algunos, mientras que otros apuntaban que «todavía es una incógnita la demostración experimental del caos en un sistema químico homogéneo, más bien lo que ha sucedido es que los resultados son el producto de un control imperfecto de los fenómenos externos». Para vencer el escepticismo de muchos científicos fue necesario realizar exhaustivas pruebas experimentales en las que se amplió el espectro de valores obtenidos modificando tanto los tiempos de residencia como las concentraciones iniciales de reactivos, datos que fueron alimentados a

programas computacionales que utilizaban herramientas matemáticas cada vez más complejas. Al mismo tiempo aparecieron informes de otros sistemas que presentaban dinámicas oscilatorias, por lo que se llegó a un punto en que era innegable la existencia de oscilaciones en sistemas aparentemente muy sencillos. ¿El aparente caos en la reacción no sería consecuencia, por ejemplo, de la suma de periodos oscilatorios diferentes en el sistema? La experimentación y simulación computacional demostró que el caos determinista estaba presente en la reacción de Belousov-Shabotinsky, los argumentos fueron los siguientes:

Se había demostrado la extrema sensibilidad del comportamiento de la reacción a las condiciones iniciales. Pequeñas modificaciones en las mismas hacían oscilar la reacción con periodos diferentes. Se demostró, por otra parte, la presencia de duplicaciones periódicas, así como de intermitencia del tipo I que, como recordamos en la ecuación logística, son rutas hacia el caos.

Además, Graziani y colaboradores demostraron más adelante que bajo ciertas condiciones de reacción, las oscilaciones se ven interrumpidas abruptamente y la reacción entra en un estado no oscilatorio.

Por último, una prueba adicional de la presencia del caos resultó cuando se comprobó la existencia de un atractor extraño. En la figura 27 se muestra la simulación que se obtuvo por computadora a partir de datos experimentales, empleando el esquema reaccional antes mencionado. La figura no es otra cosa que nuestro conocido diagrama de fases y en él se grafican los valores en escala logarítmica de tres de los componentes del sistema: el ácido bromomalónico (γ) el ion cerio-IV (β) y el ion bromuro (μ). Si el sistema tuviese un comportamiento periódico, sería de esperarse que el atractor generado fuese de ciclo limitado, pero éste no es el caso.

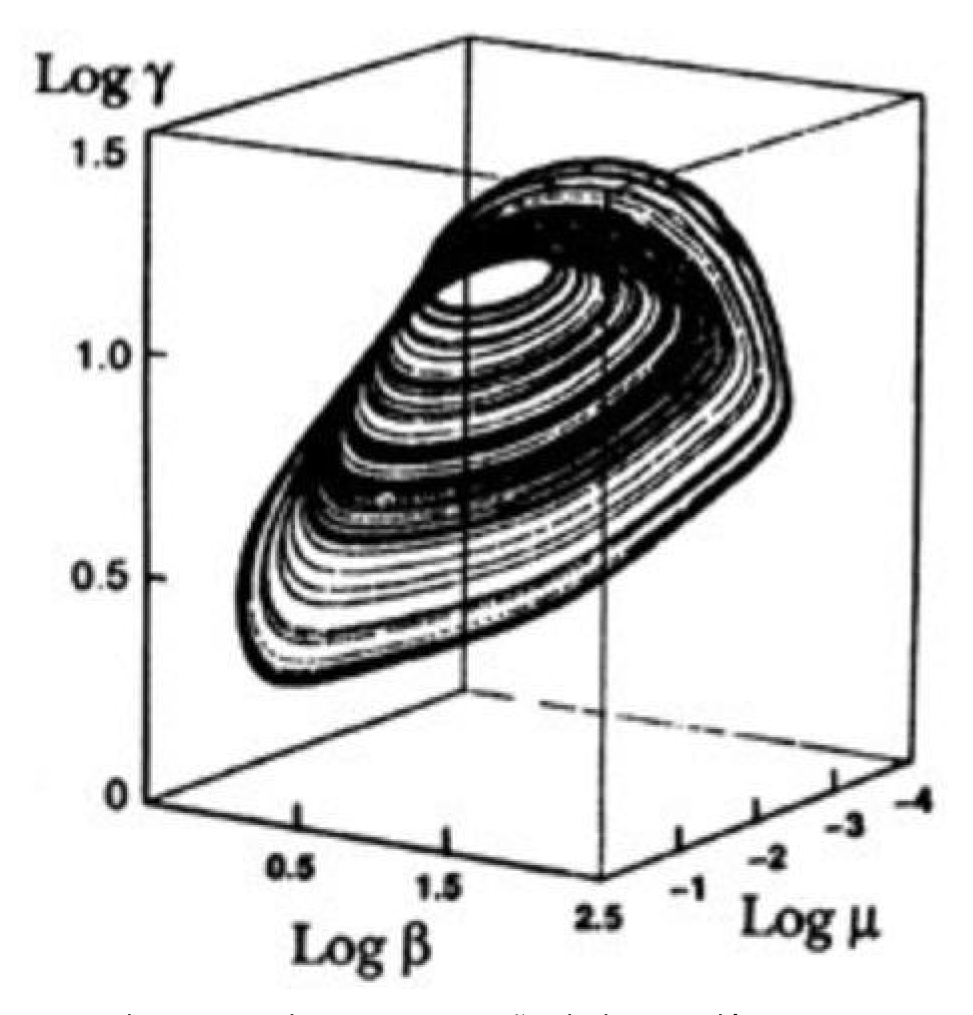


Figura 27. El atractor extraño de la reacción B - Z.

9. Las reacciones en la fase gaseosa

La existencia de oscilaciones y la potencial presencia del caos en las reacciones que se llevan a cabo entre gases no ha sido tan estudiada como la contraparte de las reacciones en solución. Una de las que se ha visto con más detalle es la producción del agua a partir de sus precursores, que se puede representar de la siguiente manera:

$$2\ H_2 + O_2 \rightarrow 2\ H_2O$$

La reacción es exotérmica, es decir, en el proceso se genera calor; para ser más precisos diremos que por cada 36 gramos de agua que se forman al estado líquido se liberan 136.6 kilocalorías. Al realizar la conversión en un sistema cerrado uno puede esperar dos tipos de comportamiento: que el proceso se lleve a cabo muy

lentamente o bien que se realice en forma explosiva. Es decir que bajo ciertas circunstancias, al mezclarse los reactivos se lleva a cabo una aceleración muy rápida de la velocidad de la reacción que conduce a la instantánea conversión de ellos en el producto final. Estos procesos que se llevan a cabo en fase gaseosa suelen presentar dificultades en el control de la transformación a temperatura constante, ya que fácilmente suelen apartarse de esa condición y para este caso la temperatura desempeña el papel de «autocatalizador». En un reactor cerrado el comportamiento de una mezcla de hidrógeno y oxígeno puede ser de dos tipos: la reacción se lleva a cabo lentamente, o la conversión es prácticamente explosiva.

En la figura 28 presentamos un diagrama típico en el que se delinean las dos zonas que hemos mencionado. En el eje horizontal se grafica la temperatura a la cual se lleva a cabo el proceso y en el vertical la presión del sistema. En la figura se han marcado tres límites, los cuales separan, en la reacción, la forma lenta de la manera explosiva; en este último caso los reactivos se convierten en agua en milésimas de segundo. La localización exacta de los límites está determinada por varios factores, entre los cuales destaca el tamaño del reactor, que influye notablemente en la región del primer límite, y también la composición inicial de los gases, que afecta sobre todo el segundo límite. Cuando se cambia la forma de realizar la combustión empiezan a suceder fenómenos más interesantes. Para poder medirlos se usa generalmente un reactor como el que describimos para la reacción de B-Z, en el cual se alimentan en forma separada el hidrógeno y el oxígeno, y se cuenta con el equipo necesario para controlar la presión y la temperatura, además de los aparatos necesarios que detectan en forma cuantitativa la cantidad de reactivos y productos presentes en cada momento. Al añadirse al reactor las cantidades apropiadas de hidrógeno y oxigeno en proporción H_2: O_2 = 2: 1, el diagrama presión-temperatura se modifica, como se ve en la figura 29, en donde se muestran exclusivamente las regiones que rodean al segundo límite de la reacción.

Figura 28. Diagrama de la reacción espontánea para la formación del agua.

Como se nota en la figura han aparecido en la zona de ignición tres tipos diferentes de comportamiento: en la zona de reacción lenta a) la ignición es constante, pero en ignición controlada las variaciones en la temperatura y la concentración de los componentes de la reacción oscilan en forma sencilla. En la región de oscilaciones a la que se llega aumentando la temperatura, las oscilaciones son mayores, lo que indica que una nueva fase de reacción se está llevando a cabo. Todo esto hace pensar que la reacción de generación de agua sigue un mecanismo tan complejo como el que vimos para la reacción de Belousov-Shabotinsky, aunque hasta ahora el sistema parece ser exclusivamente periódico. Los estudios del mecanismo de esta reacción nos demuestran que éste no es tan sencillo como se podría pensar, ya que se llevan a cabo entre 44 y 62 tipos de reacciones en las que intervienen ocho o

más especies inestables. Aún no todo está dicho de esta compleja reacción y más estudios son necesarios para revelar los misterios que encierra.

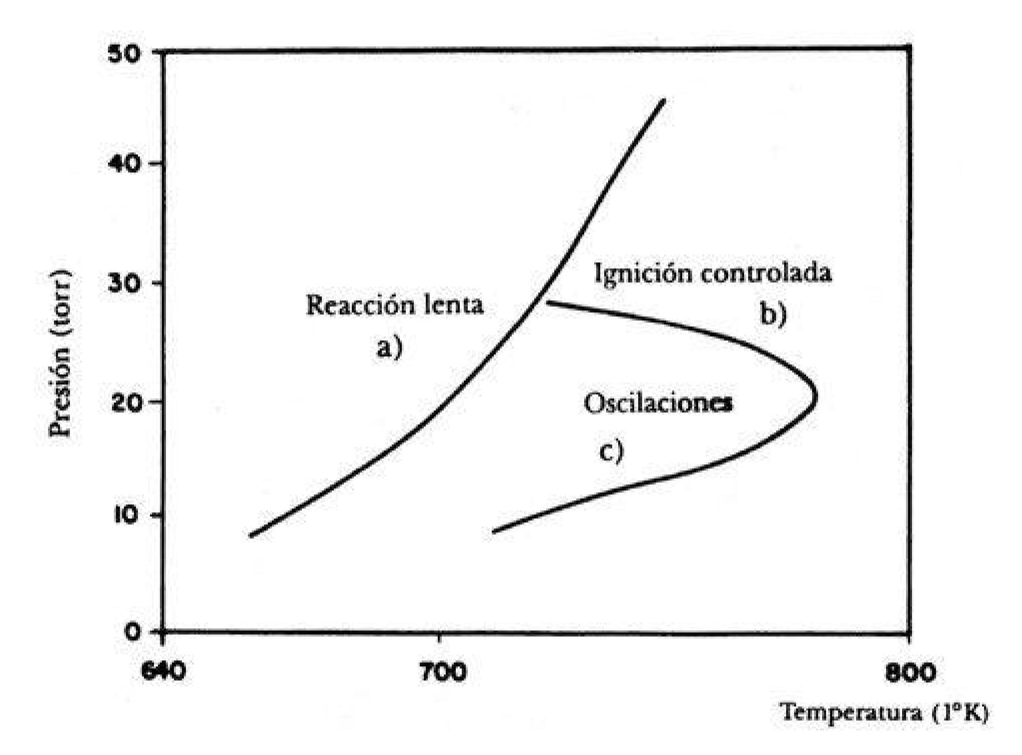


Figura 29. Segunda zona de ignición en la formación del agua.

10 Las disoluciones oscilatorias

La disolución de un metal en un medio ácido es otro ejemplo de los intrincados mecanismos que se suceden en la química. Se había informado de ciertos comportamientos anómalos a finales del siglo pasado, a los que no se les hizo mucho caso. En aquella época, los instrumentos con los que contaba el investigador no eran lo suficientemente precisos como para determinar si efectivamente se trataba de una variación oscilatoria de la concentración de una especie o si era una falla en la señal emitida por el aparato de medición. Hoy en día, la sensibilidad y precisión para controlar y medir la corriente eléctrica ha permitido revisar los datos que se tenían de la reacción de disolución de un metal por un ácido. Por ejemplo, la reacción de disolución del cobre en el ácido clorhídrico (HCl) va acompañada de la formación del cloruro de cobre (CuCl) y la liberación de hidrógeno, de acuerdo con el siguiente esquema:

$$2\,Cu + 2\,HCl \rightarrow 2\,CuCl + H_2$$

Para realizar este experimento se construye un electrodo con el metal que se emplee, que se sumerge en el ácido. J. Ávila y J. Genescá en su libro Más allá de la herrumbre (La Ciencia desde México, núm. 9) nos explican con claridad cómo se puede seguir la cinética de esta reacción. Para ello se emplea un potencióstato, que es un instrumento electrónico que impone a la muestra un potencial constante o variable, positivo o negativo, con respecto a un electrodo de referencia por el cual no pasa corriente. Para cerrar el circuito de electrólisis se utiliza un tercer electrodo, que no es atacado por el ácido. Nos dicen los autores que cuando el ácido disuelve el metal libera iones cargados positivamente a la solución y con la ayuda de una fuente externa de corriente será posible acelerar o frenar esta emisión, y por tanto aumentar o detener el ataque del metal. Nótese que el valor de corriente administrada externamente desempeña el papel de la constante K de la ecuación logística. M. Basset y J. Hudson, investigadores estadounidenses, informaron en 1987 de una serie de experiencias que realizaron sobre la disolución de un electrodo de cobre en presencia de ácido. Cuando los investigadores variaron sistemáticamente el voltaje aplicado al sistema y midieron la densidad de corriente del mismo, obtuvieron un diagrama como el que se muestra en la figura 30. Se puede observar claramente que existen dos regiones de oscilación para este sistema. Con el fin de precisar la localización exacta y la naturaleza de las bifurcaciones, los autores realizaron experimentos con voltajes precisos, midiendo la intensidad de corriente generada en función del tiempo. Para ser precisos, al aplicarse 306 milivoltios y medir la intensidad de corriente en miliamperios, empiezan a suceder fenómenos curiosos que se pueden observar en la figura 31, donde ilustramos tres periodos que ocurren secuencialmente conforme avanza el experimento. En la figura a) se nota la transición a la bifurcación entre dos valores constantes; en b) el sistema pasa a oscilar entre cuatro valores, para posteriormente en c) entrar en caos. Si se prosigue el experimento, nos dicen los autores, aparece un periodo de oscilación entre tres valores que también sufre bifurcaciones para volver a la dinámica caótica que se ve interrumpida por una

etapa en la que se obtiene un solo valor, ¡antes de que cesen totalmente las oscilaciones!

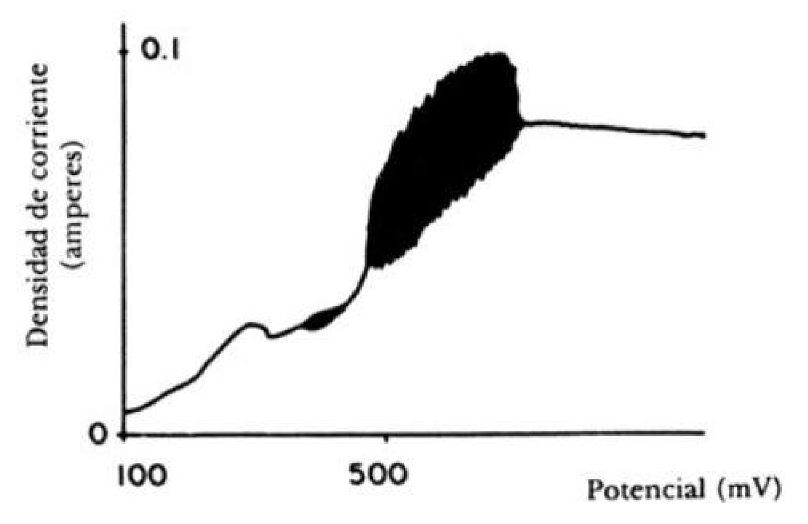
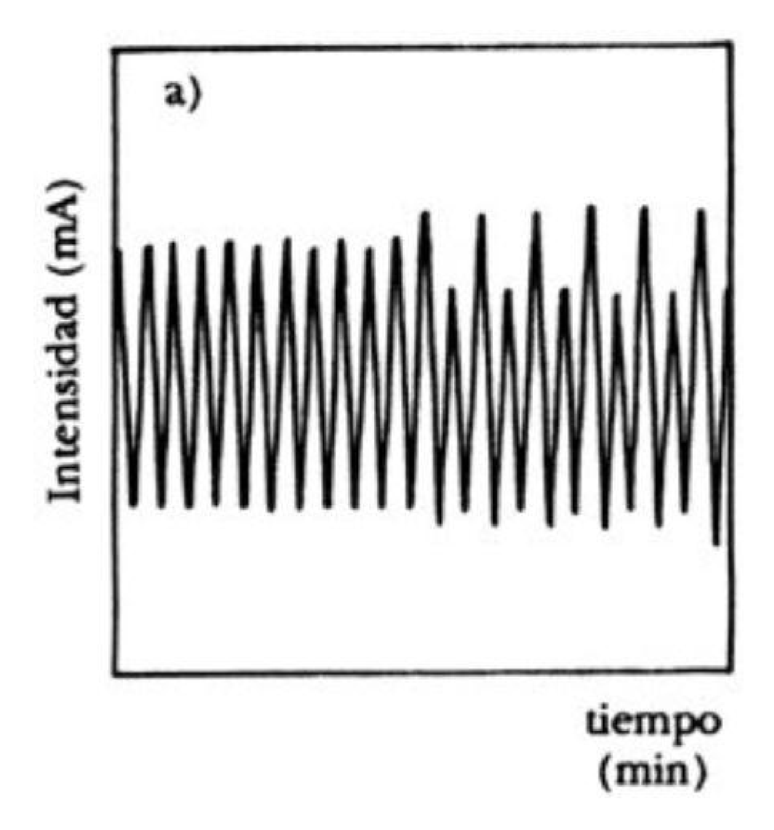
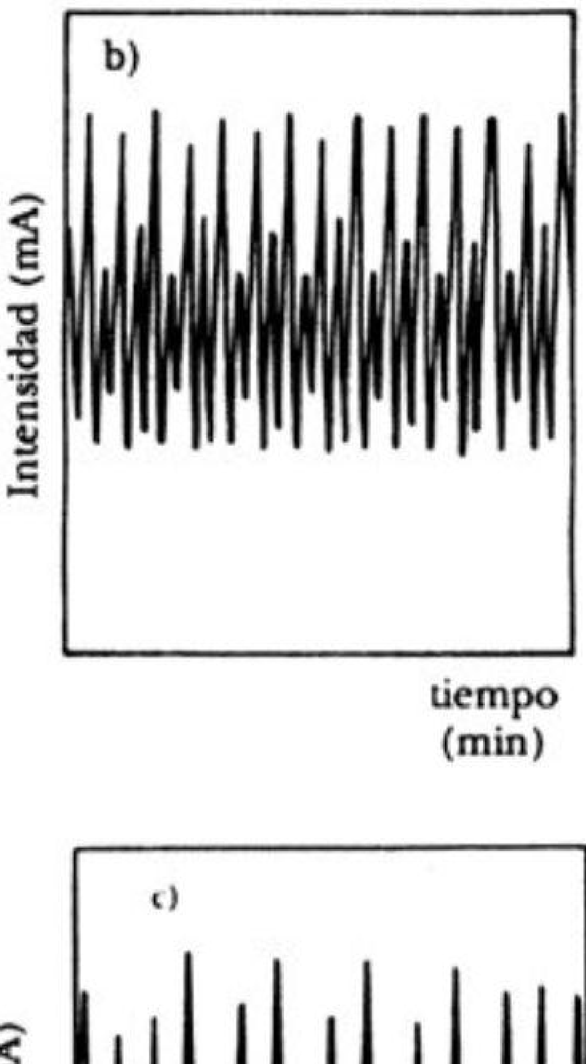


Figura 30. Diagrama potenciostático de la disolución del cobre.





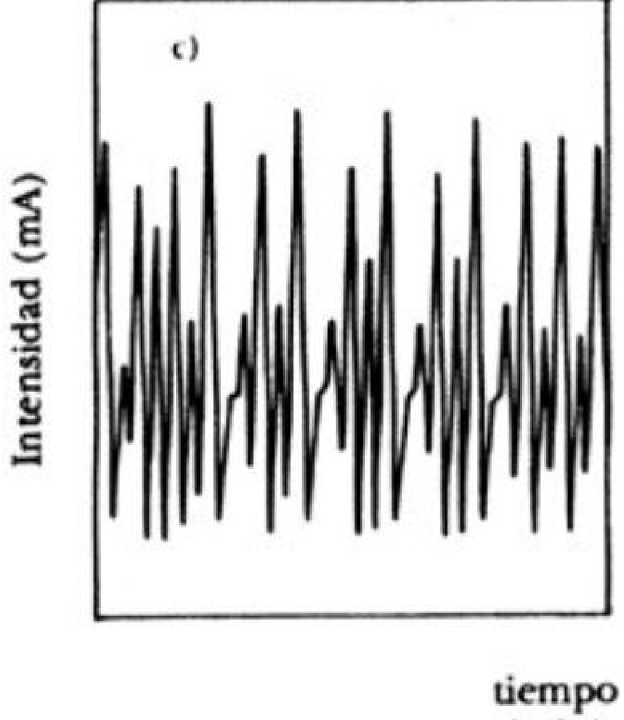


Figura 31. Oscilaciones durante la disolución del cobre. a) transición del periodo 1 a 2; b) periodo 4; c) transición de 3 a 6.

11. Los interruptores químicos

Las reacciones oscilatorias presentan al investigador un aliciente adicional para su estudio, ya que constituyen modelos sencillos de lo que sucede en sistemas más complejos, como son, por ejemplo, las reacciones en un organismo viviente, tema que abordaremos más adelante. También son útiles para entender lo que acontece en las reacciones catalíticas de interés industrial. ¿Qué sucede cuando una reacción oscilatoria se acopia con otra? Puede haber dos tipos de acoplamiento: *químico* o *físico*. En el sistema químico existen dos o más subsistemas, cada uno de ellos capaz de oscilar en forma independiente y con una o más especies químicas en común.

Piense el lector en dos reacciones, A + B y A + C, que oscilan individualmente y se realizan en un reactor que contiene A, B y C. Para el caso del acoplamiento físico se tienen dos o más subsistemas que están conectados por difusión; en términos sencillos, se trata, por ejemplo, de la misma reacción acoplada en la que cada uno de los subsistemas tiene concentraciones iniciales diferentes de reactivos, como el caso de la reacción de Belousov-Shabotinsky.

Vale la pena mencionar los resultados que se han obtenido de numerosos estudios realizados con osciladores químicos. En el primer caso los osciladores acoplados coordinan su movimiento de manera tal que el primero realiza un número de ciclos *n* en exactamente el mismo tiempo en que el segundo realiza *m* ciclos. También puede suceder que la frecuencia de las oscilaciones sea totalmente diferente o que el sistema llegue a una dinámica caótica. M. Crowley e I. Epstein, investigadores estadounidenses, encontraron en la reacción de Belousov-Shabotinsky un comportamiento sorprendente: acoplaron dos sistemas a concentraciones iniciales diferentes en un reactor y midieron con un electrodo de platino la variación en el potencial eléctrico; los resultados se ven en la figura 32. Como podemos observar, en los primeros cinco minutos de la reacción cada oscilador funciona en forma independiente, pero inmediatamente después «se apaga» la oscilación y cada subsistema muestra un potencial constante. A los 11 minutos, gracias a los dispositivos experimentales utilizados se desconectan los dos sistemas durante 40 segundos y se vuelve a restituir el acoplamiento, siguiéndose el curso de la

reacción. Se observa la existencia de dos fases complementarias estables en cada sistema y a los 19.5 minutos las reacciones vuelven a oscilar con frecuencias independientes, como en el inicio.

Otra importante propiedad de los osciladores acoplados es la forma en que se encienden.

Epstein y colaboradores han demostrado su existencia empleando una reacción pariente de la de B-Z, llamado sistema arsenito-yodato-clorito. El asunto es sencillo, la reacción entre el arsenito y el yodato produce el arseniato y el yoduro:

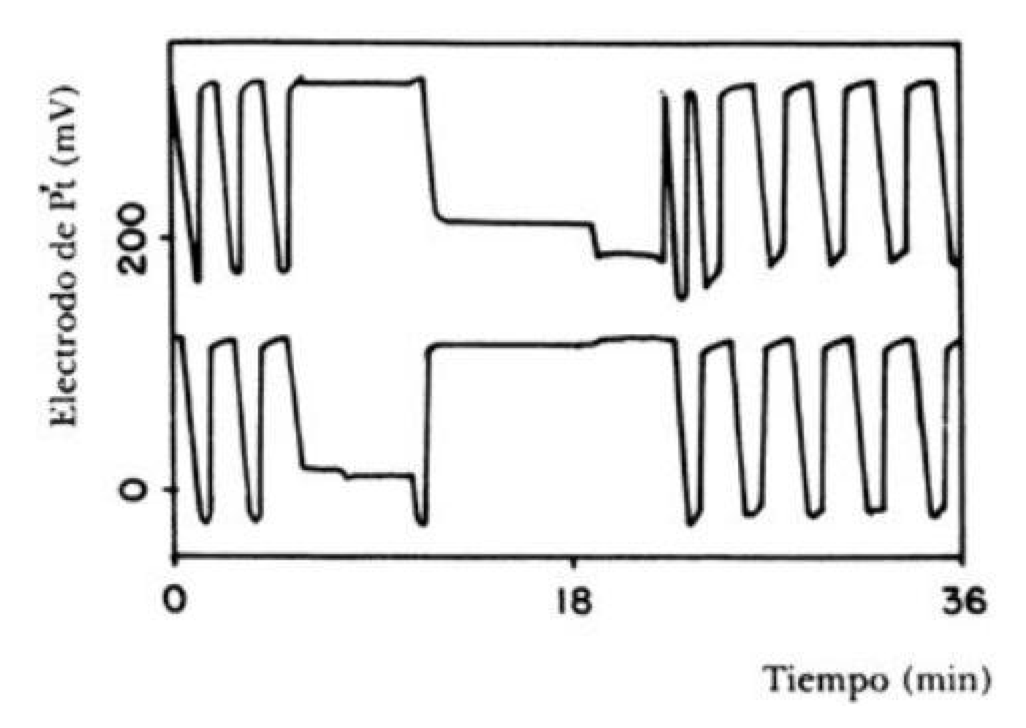


Figura 32. Oscilaciones en la reacción B-Z de un sistema acoplado.

Arsenito + yodato —› arseniato + yoduro

En este caso, el yoduro es autocatalizador. La reacción se ha estudiado a fondo, demostrándose que en un amplio rango de condiciones iniciales solamente presenta dos estados estacionarios estables. Pero por otra parte, resulta que el yoduro reacciona con el clorito para generar el ion cloruro y el yodo:

Clorito + yoduro —› cloruro + yodo

En esta segunda reacción el yodo también es un autocatalizador. Al acoplar los dos sistemas y medir el potencial de óxido-reducción las reacciones empiezan a oscilar, fenómeno que se ha bautizado con el nombre de *ritmogénesis*.

Estos resultados son muy significativos pues ayudan a comprender la dinámica de sistemas químicos y biológicos; así, por ejemplo, en el caso del acoplamiento *físico* sugiere que la formación de estructuras espaciales o temporales es resultado de las oscilaciones que se producen como consecuencia de heterogeneidades en la concentración del medio reactivo.

Veamos por último una peculiaridad adicional de las reacciones oscilatorias, la influencia de lo que se llama el *retardo en la reacción*. Volvamos por un momento a la reacción de Belousov- Shabotinsky y empleemos un modelo desarrollado en la Universidad de Oregón, Estados Unidos, que sirve para simular su comportamiento en la computadora. Las reacciones son las siguientes:

$$
\begin{array}{lllr}
A+Y & \rightarrow & X & (M1) \\
X+Y & \rightarrow & P & (M2) \\
B+X & \rightarrow & 2X+Z & (M3) \\
2X & \rightarrow & Q & (M4) \\
Z & \rightarrow & Y & (M5)
\end{array}
$$

X, Y y. Z están en concentraciones variables, mientras que las otras están fijas. Los investigadores trataron de reducir el sistema a dos variables, para lo cual combinaron los pasos (M3) y (M5) en uno solo, añadiendo B, X y Z desde el inicio de la reacción:

$$
\begin{array}{rcc}
B+X & \rightarrow & 2X+Z \\
Z & \rightarrow & Y \\
\hline
B+X & \rightarrow & 2X+Y
\end{array}
$$

Los resultados experimentales demostraron que la reacción no oscila bajo esas condiciones sino que se alcanza un estado estacionario. Lo anterior ha conducido a pensar que la sustancia Z tiene como función crear una pausa en el curso de la reacción que permite regenerar al reactivo Y en el paso 5. Seamos aún más claros:

las reacciones M1 y M2 dependen de una concentración de Y precisa, que es ajustada por el sistema mediante la reacción M3.

12. La catálisis industrial

Piense el lector en las transformaciones industriales que llevamos a cabo para proveemos de energéticos, fertilizantes, medicamentos, plásticos, *etc.* La catálisis industrial representa aproximadamente 85% de todas las transformaciones químicas que realizamos. Millones de litros de gasolina se producen día a día, combustóleos son quemados en diversos procesos industriales para generar la energía necesaria, amén de los convertidores catalíticos que funcionan en los automóviles para combatir la contaminación, sólo por nombrar algunos ejemplos. En la gran mayoría de los casos estas reacciones se realizan empleando catalizadores heterogéneos, es decir, la conversión se realiza en la interface existente entre un metal, óxido metálico u otro sólido, y uno o varios reactivos que se presentan en el estado gaseoso o líquido. Los mecanismos por los cuales una transformación química se lleva a cabo en la superficie de un sólido han sido materia de investigación constante y se sabe hoy en día que son un campo fértil para que el comportamiento no lineal se presente. Como es fácil de comprender, el trabajo en este campo reviste una importancia capital pues el conocimiento profundo de lo que sucede en un proceso catalítico tiene consecuencias sobre la eficiencia y operación de los reactores comerciales. Una de las reacciones más estudiadas en este campo ha sido la oxidación del monóxido de carbono, utilizando como catalizador alguno de los metales nobles, como por ejemplo el platino. La reacción presenta oscilaciones al llevarse a cabo en diversas condiciones de reacción que van del alto vacío hasta la presión atmosférica, además, las oscilaciones en la concentración del producto varían también con la temperatura y la cantidad de monóxido empleado al inicio. Lo interesante de la reacción no reside en la obtención de un producto de alto valor económico (lo que se genera no es más que bióxido de carbono), sino en dos aspectos: desde el punto de vista científico es una reacción en que la cinética no presenta muchos posibles intermediarios, lo que facilita el análisis; desde la perspectiva de las aplicaciones es de vital importancia pues este tipo de catalizador se emplea para eliminar el monóxido generado por la combustión

de la gasolina en los automóviles. Para que se lleve a cabo el fenómeno catalítico, tanto el oxígeno como el monóxido no reaccionan entre sí al estado gaseoso sino que previamente deben alojarse en un sitio activo de metal. Este fenómeno de retención del gas (y de manera general, de cualquier fluido) en la superficie del sólido se llama adsorción química; en él, las uniones que atan ambas partes son de naturaleza semejante a la de los enlaces químicos habituales, por lo tanto es en esencia una reacción de superficie. Hay que hacer notar que, una vez que se ha absorbido el gas, las propiedades de la superficie del catalizador, no son las mismas que tenía antes de la reacción. La reacción de oxidación del monóxido se realiza cuando éste se absorbe en un sitio de la superficie metálica, el oxígeno hace otro tanto, con la salvedad de que no queda anclado como molécula, sino como átomo. Por tanto, podemos esquematizar el mecanismo de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} CO + \text{sitio} &\rightarrow Co_{ads} \\ O_2 + \text{sitio} &\rightarrow 2\,O_{ads} \\ CO_{ads} + O_{ads} &\rightarrow CO_2 + \text{sitios} \end{aligned}$$

Las «reglas del juego» que impone el sistema para llevar a cabo la transformación nos permiten entender el porqué de las oscilaciones; éstas son:

1. *Existen en el metal sitios activos para el CO, que llamaremos para simplificar de tipo A.*
2. *Para que se lleve a cabo la adsorción del oxígeno se requiere de sitios tipo B, los cuales deben ser contiguos y libres, a fin de que cada átomo se pueda adsober.*
3. *Un sitio B libre puede ser ocupado por el CO y se convierte en tipo A.*
4. *Una molécula de CO anclada en su sitio reacciona con un oxígeno atómico vecino y forma el bióxido de carbono, con lo cual se liberan dos sitios, que al estar juntos y libres se convierten en sitios B (A + B → B + B). Por tanto, tenemos aquí el clásico sistema autocatalítico en el cual B acelera su propia creación.*

El mecanismo de las oscilaciones se explica de la siguiente manera: al inicio de la reacción la superficie del metal tiene capacidad para absorber el monóxido en mucho mayor cantidad que el oxígeno, así, la superficie se llena de CO. Esta superficie con CO ahora sí, *cataliza* la adsorción del oxígeno; éste reacciona con el CO y genera el bióxido de carbono, lo cual ocasiona que la superficie ya no tenga capacidad de fijar el oxígeno, volviendo por lo tanto al inicio del ciclo. El sutil balance de la cantidad de reactivos absorbidos en la superficie del catalizador es el responsable de que éste funcione o no; cuando en los experimentos de laboratorio se varía la cantidad de monóxido que se alimenta al sólido se presentan duplicaciones periódicas en cascada que llevan al sistema al caos.

Capítulo 3
Caos y bioquímica

Contenido:

1. *Las enzimas caóticas*
2. *El corazón*
3. *La respiración*
4. *La percepción*
5. *Caos y funcionalidad*
6. *Anticaos y auto organización*

1. Las enzimas caóticas

Si las reacciones catalíticas que se llevan a cabo en un reactor industrial pueden presentar, bajo ciertas condiciones, dinámicas complejas, ¿qué pasa en el complejo reactor catalítico que es nuestro cuerpo? Por lo general, la composición química de un adulto se mantiene constante, y si bien uno renueva constantemente sus estructuras, las reacciones que se producen en su seno son necesariamente alimentadas por sustancias que la persona toma del exterior. Estas sustancias son el oxígeno y los alimentos. En condiciones extremas, los alimentos en presencia del oxígeno se queman para darnos productos termodinámicamente estables, como el bióxido de carbono y el agua. Pero en nuestro cuerpo reaccionan a la temperatura ambiente con el oxigeno en presencia de catalizadores muy eficientes: las enzimas. Por acción de ellas los animales, por ejemplo, transforman el oxígeno y la mayoría de los alimentos en gas carbónico y agua, pero este paso se acompaña de otro en el cual parte de las sustancias se convierten en los materiales de los cuales están constituidos los seres, que no son el producto final que dicta la termodinámica del proceso.

Obviamente estas últimas (llamados productos metaestables), se convertirán en los productos más estables, lo cual permitirá la producción de trabajo o simplemente de calor. Si todas las reacciones que conducen al equilibrio termodinámico están acompañadas de un aumento de la entropía del sistema, es decir, de una degradación del orden que le caracteriza, podría parecer contradictorio el hecho de

que se generen estructuras tan ordenadas como las que poseen los seres vivientes. Durante mucho tiempo prevaleció la idea de que las reacciones bioquímicas inevitablemente convergían de inmediato a un estado termodinámicamente estacionario y que éste era único. Gracias a los trabajos de Prigogine, ya mencionados con anterioridad, se demostró que en un sistema abierto que intercambia energía y materia con el medio exterior, en el caso de que los suministros externos sean suficientemente grandes, el sistema puede tender hacia un régimen constante que no es precisamente el del equilibrio. Se trata de un estado estacionario no equilibrado y se relaciona con lo que se ha dado en llamar estructuras disipativas, es decir, estructuras que se crean y se mantienen gracias a intercambio de energía con el mundo exterior en condiciones de no equilibrio. Ya hemos mencionado que las células de Bénard son un ejemplo clásico de estructura disipativa de tipo especial, y la de Belousov-Shabotinsky representa además una estructura temporal; veamos la representación del mecanismo más sencillo de una reacción catalítica en el nivel bioquímico, en este caso para una enzima que transforma un sustrato inicial en un producto dado:

$$S \xrightarrow{E} P$$

La transformación se lleva a cabo por una secuencia de pasos que fue descrita por dos químicos alemanes, Michaelis y Menten en 1913. El ciclo lo podemos describir mediante el esquema que está representado en la figura 33. En él aparecen por lo menos tres intermediarios: una enzima libre (E), un complejo entre la enzima y el sustrato (ES) y un complejo entre la enzima y el producto (EP) para por último generar el producto de la reacción y liberar la enzima que reanuda el ciclo.

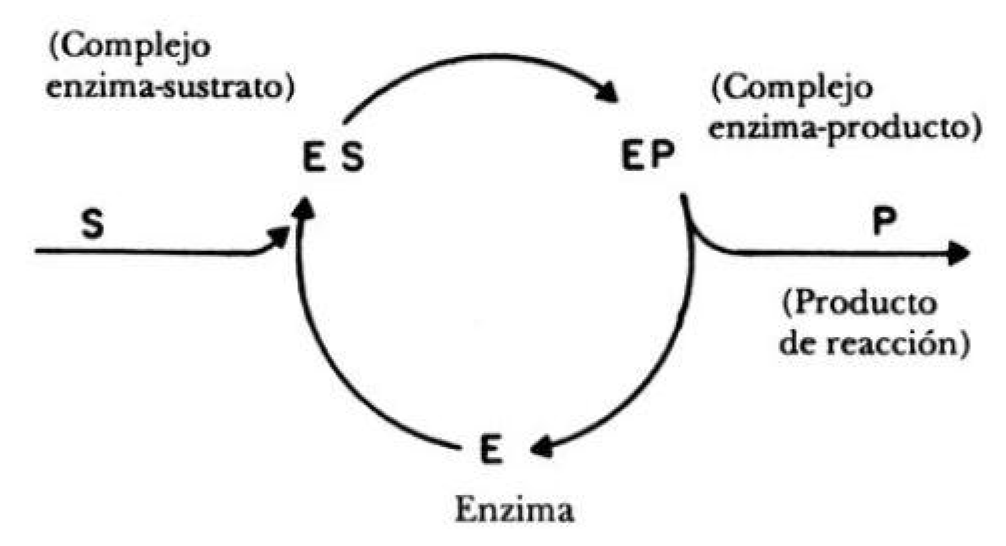


Figura 33. El ciclo de una reacción catalizada por enzima (E); S = sustrato; complejo enzima-sustrato (ES) y enzima-producto (EP); P = producto de reacción.

Veamos ahora uno de los famosos ciclos de reacción que se llevan a cabo en el nivel bioquímico en muchos sistemas biológicos. Nos referimos al llamado ciclo glicolítico; en él la conversión del adenosín-trifosfato (ATP) en adenosín-difosfato (ADP) y viceversa, desempeña un papel preponderante para almacenar y disponer la energía en los seres vivos. La glucosa constituye una materia prima importante en este proceso. Los productos finales dependen del organismo en particular y la disponibilidad de oxígeno, pero en todos los casos las primeras etapas del proceso se inician con la conversión de la glucosa en piruvato con ganancia neta en ATP. Las moléculas de glucosa en primer término aceptan grupos fósforo, convirtiéndose en la fructuosa-6-fosfato (F6P).

Este último compuesto acepta nuevos grupos fosfato, reacción que se lleva a cabo en presencia de la enzima llamada fosfofructuocinasa (PFK), generándose el ADP y la fructuosa difosfato (FDP).

Para atender mejor este asunto, que cada vez se complica más, presentamos la figura 34, en donde aparece un diagrama de la estructura de control del proceso glicolítico. Desde su descubrimiento en 1964 el ciclo ha sido el arquetipo de las reacciones oscilatorias en bioquímica; para su estudio se han empleado preparaciones de músculo cardiaco, extractos de células de hongos, *etc.* Las oscilaciones del ciclo se han puesto en evidencia al medir la concentración de la

especie NADH y se sabe hoy en día, con un alto grado de confianza, que las variaciones cíclicas son una consecuencia de los famosos interruptores químicos que actúan en las enzimas. En particular la enzima PFK es alostérica, esto quiere decir que su estructura posee subunidades catalíticamente activas en las que se realizan reacciones diferentes. Cuando un sustrato llega a uno de esos sitios puede afectar la actividad de las subunidades, incrementando la producción de una determinada sustancia a costa de inhibir la generación de otras que se realizan en un sitio diferente

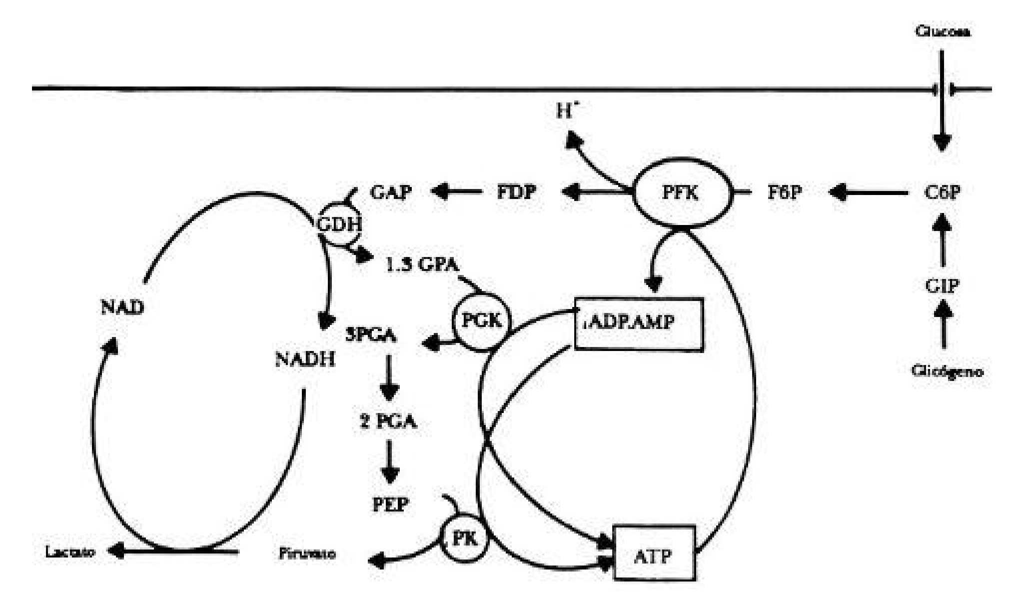


Figura 34. Esquema simplificado del ciclo glicolítico. C6P = glocosa-6-fosfato, G1P = glucosa-1-fosfato, F6P = fructuosa-6-fosfato, PFK = fosfofructo-cinasa, FDP = fructuosa-disfosfato, GAP = fosfogliceraldehído PK = piruvato-cinasa, 2 PGA, 3 PGA y 1-3 PGA = fosfogliceraldehídos, PEP = fofoenol-piruvato.

. Para el caso que nos concierne se sabe que el ATP inhibe la enzima y que el ADP la activa. El ciclo glicolítico se ha presentado mediante el esquema de la reacción que ya vimos, y sus oscilaciones periódicas se han reproducido mediante la ayuda computacional. Los investigadores han modificado el modelo en la computadora haciendo variar la concentración inicial de glucosa: el caos se hizo presente en dichos modelos entre regiones de oscilaciones simples y otras más complejas. Bueno, dirá el lector, eso no es más que la simulación en computadora, pero no hay ejemplos autónomos de casos en sistemas bioquímicos. Para aclarar este punto

pasemos a otro ejemplo que esperamos sea más convincente. En la figura 35 representamos en forma muy esquematizada el llamado ciclo del ácido cítrico, mejor conocido como ciclo de Krebs, en honor a Hans Krebs, bioquímico alemán nacido en 1900.

El ciclo es uno de los mecanismos más importantes que tienen los organismos vivos, pues regula el metabolismo de los carbohidratos y de los ácidos grasos en las células, además de ser fundamental en los procesos biosintéticos. La reacción neta consiste en la oxidación completa de dos grupos carboxílicos (CH3COOH) en bióxido de carbono y agua. Durante el transcurso de la transformación se generan doce enlaces fosfato de alta energía, y algunos de ellos provienen de una reacción de oxidación de la especie nicotinamida-adenina dinucleótido (NADH), la cual interviene en varias partes del ciclo de Krebs, catalizada por una enzima llamada peroxidasa.

Tomemos una lupa imaginaria e indaguemos en este vasto y complejo mecanismo donde intervienen otros reactivos y productos no incluidos en el esquema de la reacción de oxidación del NADH catalizada por la enzima peroxidasa. Un modelo sencillo de la reacción es el siguiente:

$$O_2 + 2H^+ + 2\ NADH \rightarrow 2H_2O + NAD^+$$

La reacción consiste en la oxidación del NADH con la consecuente reducción del oxígeno molecular en presencia de un ácido, representado por la especie H+. La enzima interviene en su forma oxidada y reducida, asociada en ambos casos con el ion Fe (quizá el lector pueda de inmediato llegar a la conclusión de que lo que estudiaba el biofísico Belousov en su laboratorio estaba relacionado con el ciclo de Krebs, cuando encontró la peculiar reacción que hemos visto).

En 1965, muy poco tiempo después de haber sido descubierta la reacción de Belousov, un grupo japonés encabezado por I. Yamazaki informó que bajo ciertas condiciones experimentales, la concentración de oxígeno medido presentaba oscilaciones periódicas. En otra parte del orbe, los daneses L. Olsen y H. Degn emprendieron un largo proyecto de investigación para estudiar las misteriosas oscilaciones de esta reacción bioquímica. Comprobaron que al disminuir paulatinamente la cantidad inicial de enzima que se añadía a la reacción, había un

punto en donde era posible obtener un comportamiento *caótico*, como lo llamaron en un artículo publicado en 1977. La investigación no quedó ahí; se llegó a proponer un modelo cinético que, mediante simulación computacional, era capaz de reproducir los resultados obtenidos en el laboratorio y, más aún, dibujar el tipo de atractor extraño que se generaba. He aquí un modelo simplificado del mecanismo de reacción:

$$A + B + X \rightarrow 2X \qquad (R1)$$
$$2X \rightarrow 2Y \qquad (R2)$$
$$A + B + Y \rightarrow 2X \qquad (R3)$$
$$X \rightarrow P \qquad (R4)$$
$$Y \rightarrow Q \qquad (R5)$$

En este caso, A representa la cantidad de oxígeno proveniente de la fase gaseosa que se disuelve en la solución reaccionante, B representa la cantidad de NADH, X y Y son especies intermedias que no aparecen en los productos finales, mientras que P y Q son dichos productos. Hemos de aclarar que en la práctica se ha constatado que la reacción tiene más de veinte pasos, muchos de ellos aún no conocidos con suficiente detalle. El lector ya habrá observado que la dinámica de la reacción no es tan sencilla como aparenta, por lo que en la figura 36 se presenta un diagrama para aclarar el proceso. Note que las tres primeras reacciones son autocatalíticas, y que en la primera y en la tercera se genera el mismo producto, X, pero con reactivos diferentes en cada caso. Así encontramos dos subsistemas que operan entrelazados a manera de interruptores químicos; por tanto es de esperar que bajo ciertas circunstancias las oscilaciones actúen en forma sincronizada, otras veces en forma alternada y lo más importante, que en algunas ocasiones entren en un estado caótico.

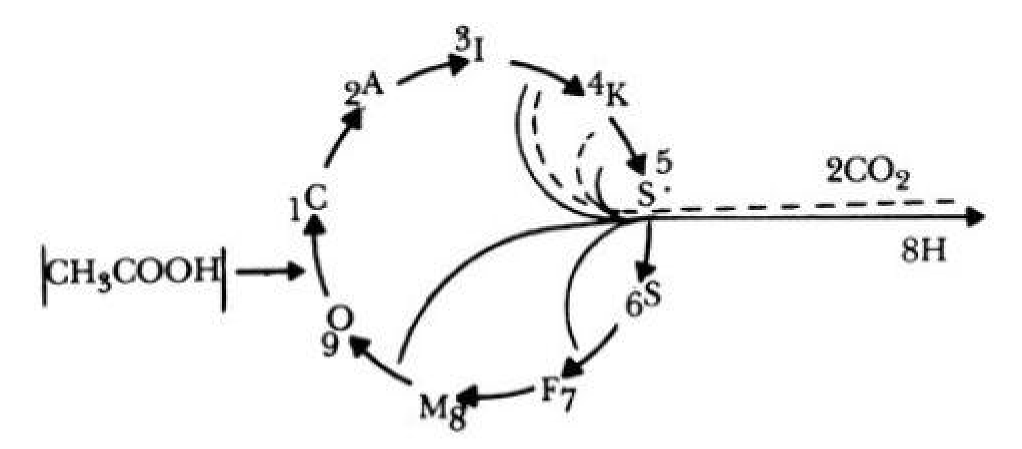


Figura 35. Diagrama simplificado del ciclo de Krebs. Los componentes principales son: C = citrato, A = cis-aconiato, I = isocianato, K = alfa cetoglutárico, S5 = succinil coenzima A, S6 = succinato, F = fumarato, M = malato, O = oxaloacetato. El acetato entra al ciclo como acetil coenzima A (paso 1 y reacciona con el oxaloacetato y agua para formar el citrato.

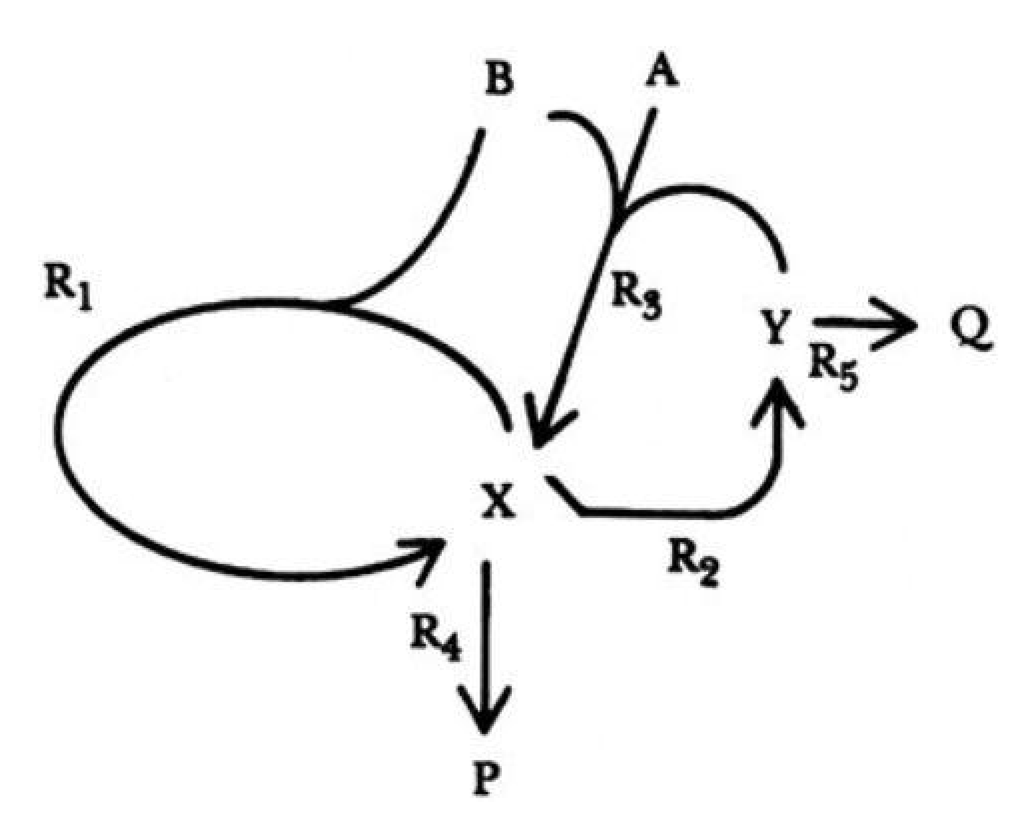


Figura 36. Esquema del ciclo de la oxidación de la NAHD catalizada por la peroxidasa.

2. El corazón

En 1970, A. Zaikin y nuestro conocido A. Shabotinsky publicaron un artículo en el cual describían algunas peculiaridades de la reacción B-Z. Haciendo referencia a la propagación de las ondas producidas por las oscilaciones del sistema, decían que un modelo muy parecido debería aplicarse para explicar los impulsos de propagación en el músculo cardiaco. Una de las referencias que nos dan los autores es nada menos que un artículo aparecido en los archivos del Instituto de Cardiología de México, firmado por N. Weiner y A. Rosenblueth en 1946.

Podemos hacer una analogía entre la reacción química de B-Z y el músculo cardiaco imaginando que las «especies que se propagan» en el primer caso representan un potencial eléctrico para el segundo y que «el catalizador» está constituido por un conjunto de proteínas diseminadas en células especializadas. Las ecuaciones que gobiernan tal sistema, que incluyen la reacción y difusión, son diferenciales, como las que se aplican a las reacciones químicas que hemos descrito en el curso de este libro. Veamos entonces dónde entra el caos en el corazón.

Primero revisemos la forma en que trabaja. El corazón es un músculo cuya función es semejante a la de un motor; su contracción (sístole) alterna con periodos de reposo (diástole) y ese movimiento está gobernado por un sistema de «arranque» que asegura el funcionamiento automático de este sistema mecánico. Los datos electroquímicos asociados con el latido del corazón se registran mediante el electrocardiograma, inventado en 1903 por el fisiólogo holandés W. Einthoven, ganador del premio Nobel de medicina y fisiología en 1924. El principio es sencillo: la actividad de las células responsables del automatismo cardiaco se acompaña por fenómenos eléctricos característicos que se registran con la ayuda de electrodos dispuestos en la superficie del corazón. La contracción de las aurículas, que precede a la de los ventrículos es provocada por la activación automática y regular de un grupo de células anatómicamente diferentes de las células contráctiles situadas en la parte alta de la aurícula derecha. De ahí parte una corriente eléctrica que provoca la activación de las células vecinas de las dos aurículas, pero que es transmitida a los ventrículos al poco tiempo mediante otro grupo de células especializadas que forman una red que se disemina en los ventrículos, algo así como el «cable eléctrico» que permite la conexión entre las células especializadas en la conducción y las células cardiacas puramente contráctiles. La contracción está precedida por

cambios eléctricos llamados *despolarizaciones*, que se registran mediante los electrodos. En el electrocardiograma se aprecia una primera onda que corresponde a la de polarización de las aurículas, seguida de una segunda provocada por la contracción de los ventrículos, y por último otra que proviene de la repolarización de los ventrículos.

L. Glass y colaboradores llevaron a cabo en Canadá un estudio experimental que ha revelado datos muy interesantes sobre el comportamiento de las células cardiacas. Los investigadores aislaron un grupo de este tipo de células en embriones de pollo, las cuales transferidas a un medio de cultivo apropiado, laten espontáneamente con un ritmo regular que se registra con la ayuda de diminutos electrodos. Estos últimos sirven también para enviar a las células pulsos de corriente en las diversas fases del ciclo espontáneo de latidos. Si se asume que la dinámica del movimiento del corazón puede ser representada por una ecuación diferencial que describe la evolución en el tiempo, la representación del oscilador cardiaco en un diagrama de fases describirá un atractor de ciclo limitado. Un estímulo eléctrico desplazará el oscilador hacia un nuevo punto en el espacio de fases, distancia que puede ser medida experimentalmente.

Glass y colaboradores observaron que al aplicarse un campo eléctrico fuerte, el latido siguiente ocurre más pronto o después de lo normal. Si se aplican impulsos periódicos el

agregado celular se encuentra solicitado por dos fuerzas de periodos diferentes: uno con el ritmo intrínseco de las células cardiacas y el otro con el ritmo provocado por la corriente eléctrica aplicada externamente. El latido cardiaco que se produce dependerá de la relación existente entre los dos periodos. En ciertos casos las células laten una, dos o tres veces seguidas por cada dos impulsos externos, pero en otras circunstancias la contracción es aparentemente azarosa,

produciendo formas irregulares, caóticas. Estas experiencias son interesantes porque muestran que se puede inducir caos en un sistema artificial que simula los procesos cardíacos. Además, cuando se comparan las dinámicas observadas en el experimento con las que detecta el electrocardiograma de pacientes cardiacos, existe una notable similitud. Glass ha llegado a la conclusión de que muchos problemas patológicos de los humanos son producto de lo que él ha dado en llamar

enfermedades dinámicas. Este tipo de enfermedades, que es el caso de las cardiacas, resultan de cambios en las variables fisiológicas que normalmente se responsabilizan de los procesos rítmicos, las cuales de repente fluctúan de manera caótica. En el hombre adulto, el ritmo cardiaco normal es de 60 a 100 latidos por minuto. Hay dos grandes categorías de problemas rítmicos: por una parte está la aceleración de la frecuencia cardiaca, taquicardia, y por la otra la desaceleración del ritmo a menos de 60 latidos, que se conoce como braquicardia. Los síntomas de cualquiera de los dos tipos de enfermedades van desde la fatiga al esfuerzo, hasta la muerte súbita. En este último caso, es bien conocida la llamada fibrilación ventricular, que se manifiesta por una anarquía total de la contracción de las fibras musculares y que es antecedida por un ritmo cardiaco caótico generado por bifurcaciones periódicas como las que presenta la reacción de Belousov. Hay quien afirma, como es el caso de A. Goldberger de la Escuela de Medicina de Harvard, que el caos procura al cuerpo humano una flexibilidad que le permite responder a diferentes tipos de estímulos; para el caso específico del ritmo cardiaco afirma que en una persona normal éstos son caóticos. Su afirmación se basa en el análisis del espectro de frecuencia del electrocardiograma de personas sanas y pacientes cardiacos. Para el caso de los primeros, dice Goldberger, se presentan irregularidades que van desde algunos segundos hasta días, mientras que en los enfermos los espectros son más constantes. Como es común en las ciencias, hay quien refuta las observaciones del autor y afirma que no necesariamente existe el caos, ya que las irregularidades pueden ser señales que se reciben accidentalmente en el organismo en el momento en que se hacen los registros.

3. La respiración

¿Tiene usted una respiración irregular? ¡Atribúyale la enfermedad al caos! Este padecimiento es otro de las llamadas enfermedades dinámicas. Le explicaremos su problema: usted tiene dificultad en el control de la eliminación del bióxido de carbono. Es posible analizar este padecimiento matemáticamente. Considere la ecuación diferencial: $dX/dt=A - Bx$, en la cual X es la variable de interés, t es el tiempo, y A y B son constantes positivas que representan la velocidad de producción y eliminación de la variable X. En muchos sistemas fisiológicos, A y B no son

constantes sino que dependen del valor que tenía X en un tiempo previo. Por lo tanto, la velocidad instantánea de cambio de X respecto al tiempo es función de un valor $X_{t-\alpha}$. Si se aplica una ecuación de esta naturaleza al sistema de control fisiológico que nos ocupa, A representa la velocidad de producción del bióxido de carbono y en B quedan englobados factores como el tiempo transcurrido entre la oxigenación de la sangre en los pulmones y la estimulación de los receptores químicos por parte del cerebro. Al proveer de valores a la ecuación e iterarla para diversos tiempos se genera un diagrama en el que se grafica el volumen del bióxido de carbono expelido, el cual reproduce oscilaciones no periódicas en el proceso con las clásicas características de los fenómenos caóticos, como por ejemplo la sensibilidad a las condiciones iniciales. Por lo tanto, este modelo matemático sencillo de la circulación del bióxido de carbono en el curso del proceso respiratorio puede presentar un comportamiento irregular y caótico para ciertos valores de los criterios característicos de la biofísica del ciclo del bióxido, resultados que son comparables con los que se observan en ciertos pacientes que han sufrido accidentes cardiacos congestivos. M. Mackey y L. Glass, autores del trabajo anterior, sugieren que es muy importante profundizar en el conocimiento de los datos experimentales y clínicos que se poseen de los pacientes, para determinar si existen secuencias de bifurcaciones similares a las observadas en el modelo; además insisten en que es necesario diseñar nuevas estrategias terapéuticas basadas en la manipulación de los criterios de control identificados, para así resolver enteramente estos padecimientos a la mayor brevedad posible.

4. La percepción

W. Freeman, profesor de neurobiología de la Universidad de California ha estudiado por más de 30 años los fenómenos de la percepción. Al ver, oír y escuchar, nuestro cerebro desencadena en fracción de segundos un mecanismo complejo por el cual reconocemos el estímulo que lo provoca. La percepción, nos dice el autor, no puede comprenderse examinando únicamente las propiedades microscópicas de las neuronas en forma individual, se debe entender que se trata de la acción cooperativa de millones de neuronas que están localizadas en diferentes puntos de la corteza cerebral. El caos determinista, según Freeman, está presente en esos

mecanismos complejos, ya que representa una forma de entender cómo un grupo de neuronas cambia abruptamente la actividad que realiza al menor estímulo. Se adentra en el terreno de la especulación y propone que gracias al caos es posible que el cerebro sea flexible en su respuesta al mundo exterior y más aún, que sea capaz de generar nuevos modelos de actividad. Alejémonos de la especulación y veamos cuáles son los trabajos de Freeman que lo han llevado a tales afirmaciones. El científico ha dedicado mucho esfuerzo para comprender cómo funcionan las neuronas del sistema olfatorio; veamos lo que se conoce al respecto.

Cuando se huele un aroma las moléculas que lo provocan son capturadas por una pequeña porción del inmenso número de receptores neuronales que se encuentran ubicados en la nariz. De alguna manera, cada receptor está especializado para responder a un tipo de aroma en particular.

El estímulo genera en las células una serie de pulsos que se propaga vía los axones hasta el llamado bulbo olfatorio; aquí se analizan los estímulos recibidos y se transcriben en un nuevo mensaje que es transmitido por los axones hacia la corteza olfatoria; ésta se encarga de enviarlo a muchas partes del cerebro que mezclan dichas señales con las provenientes de otros sistemas sensoriales. El resultado de todo este proceso es la percepción de un aroma que es único para cada individuo. Experimentalmente, Freeman y sus colaboradores entrenan a un grupo de animales para que respondan al estimulo de varios aromas, en cada caso se enseña al animal a que se comporte de una manera particular ante un aroma en particular. En «recompensa» al aprendizaje se le colocan 65 electrodos en gran parte de la superficie bulbar, con los que pueden obtener simultáneamente otros tantos electroencefalogramas (EEG) que miden la actividad neuronal. El registro de los EEG para la región del bulbo olfatorio y la corteza olfatoria muestra ondas de baja frecuencia que se ven interrumpidas por oscilaciones de gran amplitud y alta frecuencia cuando el animal percibe el olor. Estas oscilaciones duran una fracción de segundo en el intervalo entre la inhalación y exhalación. Como dato curioso debemos apuntar que este mismo modelo de oscilaciones se encuentra en la reacción de Belousov-Shabotinsky cuando la experiencia se realiza en un sistema abierto. Estos sobresaltos oscilatorios representan una actividad cooperativa del sistema neuronal del cual se puede obtener un mapa donde se grafican las

amplitudes por medio de cada uno de los electrodos. El mapa revela un diagrama de contornos con elevaciones de valles y montañas que se repite cuando el animal vuelve a inhalar un aroma en particular. Hay muchas razones para creer que la actividad del cerebro durante los sobresaltos, y en los espacios de tiempo entre ellos, es caótica y no simplemente azarosa. La diferencia entre estos dos estados es similar a la que existe entre la gente que transita por una estación de correspondencia del Metro y una multitud aterrorizada.

En el primer caso, aunque la gente pasa corriendo para tomar un determinado tren, en el proceso hay un orden oculto y el flujo de movimiento puede cambiarse si se ordena por el altoparlante un cambio en la dirección de los trenes. En el caso de la multitud en pánico un anuncio no cambiará nada la situación y la cooperación no hará acto de presencia.

Entre las aparentes evidencias de que el fenómeno es caótico podemos mencionar el que el conjunto neuronal del bulbo y la corteza pasan al unísono e instantáneamente de periodos de sobresaltos a otros de aparente calma, para reincidir de nuevo en las oscilaciones, comportamiento que es propio de los estados caóticos que en física llamamos transiciones de fase, y bifurcaciones en matemáticas. Más evidencia se suma a los hechos cuando los autores desarrollan y aplican un modelo computacional del sistema olfatorio en su totalidad. Mediante esta herramienta se simula la actividad del sistema resolviendo un conjunto de ecuaciones diferenciales que «describen» la dinámica de las neuronas. El modelo, ante el estímulo de un simple pulso (equivalente a la excitación de unas cuantas neuronas) es capaz de reproducir una actividad semejante a la que se observa en los EEG. A partir de esta simulación se representan los resultados de la actividad mediante un diagrama de fases en donde se grafican las amplitudes en función del tiempo (en este caso a cada milésima de segundo de intervalo). El resultado es un atractor extraño. Los científicos piensan que el caos en el cerebro es consecuencia de que dos áreas, en este caso el bulbo y la corteza, se excitan una a otra pero no son capaces de generar una frecuencia común de oscilación. La competencia entre las partes incrementa la sensibilidad e inestabilidad del sistema, que contribuyen al caos, afirmación que se confirma cuando se interrumpe la conexión entre el bulbo y la corteza, ya que el caos desaparece.

5. Caos y funcionalidad

Entre los científicos, en particular en aquellos dedicados al estudio de la evolución, existen dos posturas respecto al papel que pueden desempeñar las dinámicas caóticas en los seres vivos. Hay quienes categóricamente afirman que éstas no existen en las poblaciones reales y añaden que de existir fluctuaciones caóticas se crearía un riesgo intrínseco en la evolución que ocasionaría la extinción progresiva de dicha especie. M. Conrad, especialista en biología y las ciencias de la computación de la Universidad de Wayne, Estados Unidos, tiene una visión diferente. Hemos visto que muchos modelos dinámicos de los complejos sistemas biológicos llegan a ser caóticos si se escogen ciertos valores para los criterios que los controlan. Los resultados caóticos de estas ecuaciones son semejantes a los obtenidos en reacciones químicas inorgánicas como la de Belousov-Shabotinsky. ¿Cuál es entonces la función que tiene una dinámica caótica en un organismo vivo? Conrad nos lo explica de la siguiente manera: la posibilidad de interpretar el caos biológico en términos funcionales está basada en el hecho de que cualquier sistema de este tipo debe ingeniárselas para permanecer en el juego de la vida. Para ello es necesario que la dinámica de las partes que lo conforman sea consistente con la dinámica del conjunto y ésta a su vez sea consistente con sus partes. El más importante mecanismo para alcanzar tal autoconsistencia es la selección natural. Si la dinámica de un organismo individual no es congruente con la estabilidad del ecosistema como un todo, será inevitable que la selección natural lo elimine. En su evolución hacia estados que le permitan seguir funcionando, Conrad nos dice cuáles son las posibles funciones que puede tener el caos; revisémoslas brevemente:

1. *Búsqueda de nuevos procesos. En esta categoría se genera y se ponen a prueba un conjunto de posibilidades nuevas. Entre ellas, la más importante sería la diversificación genética a través de la mutación y otras operaciones genéticas. Con ello se crearían nuevos genotipos sobre los cuales actuaría la selección natural. Aún no hay evidencia directa de que las dinámicas caóticas actúen directamente en el nivel genético.*
2. *Defensa. Los mecanismos caóticos pueden ser empleados para evadir a los predadores. Por ejemplo, un animal que se mueve de manera azarosa (por*

ejemplo mariposa) es más difícil de atrapar que aquél que posee movimientos predecibles. En este caso se podría pensar que el caos está instalado en el nivel neuronal.

3. *Previene al sistema biológico de la «burocracia». En ausencia del caos, la actividad del sistema se anquilosaría de tal manera que le sería difícil responder en forma dinámica a un estímulo que la acecha. El éxito de la adaptabilidad será más eficiente en un sistema cuyas partes están más descentralizadas, más independientes. Piense el lector en el sistema inmunológico; la gran diversidad de moléculas de inmunoglobulina hace posible que el organismo pueda luchar con un mundo microbiano muy diverso.*

6. Anticaos y auto organización

El descubrimiento del caos determinista en muchas áreas de la ciencia y en especial aquellas relacionadas con la química de los seres vivos, ha motivado en los científicos nuevas reflexiones que intentaremos resumir en este apartado. Es obvio que todos los sistemas vivientes son estructuras muy bien ordenadas que permanecen en el juego de la vida gracias al equilibrio preciso entre la actividad química y el comportamiento. Hay quienes piensan, como S. Kauffman, profesor de bioquímica y biofísica de la Universidad de Pennsylvania, que es posible que el orden biológico sea un reflejo parcial del orden espontáneo sobre el cual actúa la selección natural. Esta moldea la coherencia propia del desarrollo biológico, y es la evolución la que aporta la capacidad para cambiar y adaptarse. Una nueva vertiente, tentativa e incompleta, nos dice Kauffman, emerge en ese sentido: la evolución se comprende como la sumatoria de la selección y la auto organización, esta última es una propiedad innata de algunos sistemas complejos. Los sistemas complejos presentan fenómenos como el caos determinista, pero también, dice el autor, podemos pensar en el *anticaos*, un sistema desordenado que «cristaliza» en orden. ¿Cómo funciona la lógica y estructura de un sistema regulatorio, como sería el caso del genoma de un ser humano con capacidad para formar 100.000 diferentes proteínas? Para estudiar el problema se crean modelos matemáticos que describen cómo los elementos individuales del sistema se conectan y regulan

mutuamente mediante funciones lógicas. Cada combinación de funciones que se genera constituye un nuevo estado del sistema y la sucesión de estados es la trayectoria que sigue el sistema. El modelo presupone que existe un número finito de estados y que a la larga el sistema volverá a un estado anterior: esto se llama un atractor dinámico. Mediante la simulación se ha demostrado que para un sistema constituido por N elementos, en el que cada uno puede ser modificado en su comportamiento por tres posibles señales, S, el nuevo estado del sistema tiene un comportamiento caótico, hay sensibilidad a las condiciones iniciales, y si el número de elementos crece el tamaño del ciclo también, pero exponencialmente. Sin embargo, cuando S=2, las propiedades caóticas desaparecen abruptamente y el sistema exhibe un orden colectivo espontáneo y los atractores resisten, por así decirlo, a mínimas perturbaciones. ¿Por qué un sistema que tiene únicamente dos señales por cada elemento exhibe tal orden? La respuesta no es fácil; los especialistas que estudian los mecanismos de transmisión de señales en un sistema conectado entre si nos indican que en el vasto enrejado interconectado se forman cúmulos de elementos que se encierran en sí mismos como islas que permanecen funcionando en forma aislada y no pueden propagarse; el sistema en su totalidad se ordena porque los cambios en su comportamiento son pequeños y aislados.

Si cada uno de los 100 000 elementos que posee el genoma humano recibiera dos señales, potencialmente podría asumir 10^{30000} diferentes estados. Sin embargo, el sistema asume un orden tal que el número de ciclos calculados no pasa de 370 estados. Si uno supone que cada tipo de célula es en sí un atractor, debería ser posible predecir cuántos tipos de células aparecen en el organismo. El número de atractores es aproximadamente igual a la raíz cuadrada del número de elementos en el sistema, por tanto, el número de tipos de células debería ser casi igual a la raíz cuadrada del número de genes. Si se asume que ese número es proporcional a la cantidad de ADN en una célula, entonces los humanos tendrían aproximadamente 100 000 genes y 370 variedades de células. La cuenta más reciente en los humanos distingue 254 tipos, la predicción del modelo no está muy alejada de la realidad. Otra predicción de este tipo de modelos se refiere a la estabilidad de los diferentes tipos de células. Si cada célula es un atractor, entonces no puede ser fácilmente alterada por cualquier perturbación, ya que su estabilidad es una propiedad que

emerge el sistema regulatorio que tienen los genes, hipótesis de la evolución que está gobernada por sistemas regulatorios que funcionan en el límite entre el orden y el caos.

Epílogo

EL CAOS determinista aporta una visión contraria a la que se tuvo durante mucho tiempo en el sentido de que un sistema se podía conocer si se estudiaban por separado las partes que lo constituyen. Con el caos se ha demostrado que un sistema puede exhibir un comportamiento muy complicado que emerge como consecuencia de la interacción no lineal de unos cuantos componentes del mismo. Por lo tanto, para que se presenten las oscilaciones y el caos, como también la posibilidad de tener varios estados estables, no se requieren complejos bloques de construcción. Hemos visto que ecuaciones matemáticas muy sencillas generan resultados en donde es imposible la predicción del valor, si hay un número de requisitos mínimos satisfechos. Tal parece que este comportamiento también aparece en la química. Antes de que se comprobara la existencia de las oscilaciones en la química, se invocó la segunda ley de la termodinámica en forma incorrecta y se esgrimió como argumento para comprobar la inexistencia de las oscilaciones. Sin embargo, las reacciones químicas no hicieron caso de tales ideas y siguieron oscilando, por lo que los científicos tuvieron que pensar con más cuidado sobre estos fenómenos.

En las páginas anteriores hemos visto ejemplos experimentales de oscilaciones complejas y rutas hacia el caos en casi todo el rango de sistemas químicos: sistemas homogéneos en fase gaseosa, en solución y reacciones sólido-gas, también en procesos heterogéneos que comprenden interfaces gas-sólido y sistemas bioquímicos; en todos ellos se apuntan aspectos cualitativos muy similares.

Muchos investigadores, reacios al inicio a aceptar los hechos experimentales obtenidos en muchos laboratorios, se han convencido de que a pesar de la incertidumbre que existe para fijar con precisión las condiciones experimentales y la adquisición de datos, el caos está presente en forma potencial, aun en las reacciones clásicas descritas en los libros de texto.

Tal vez lo que resulta del aprendizaje del caos en la química (y en muchas otras disciplinas) es que aun cuando seamos capaces de obtener las leyes cinéticas que gobiernan la reacción a partir de un mecanismo detallado del cual conocemos todos

los intermediarios, la predicción siempre será incierta y el problema no se solucionará gastando más dinero en costosas computadoras que simulen los datos. La única alternativa sería determinar todas las concentraciones iniciales con una precisión infinitamente exacta, pero eso es imposible (fantaseando, tal vez La Compañía del cuento de Borges lo pudiera hacer). Pero en el fondo no estamos del todo perdidos; aunque renunciemos a las predicciones a largo término, la teoría del caos puede ayudarnos a evaluar qué tan predecible es un sistema, en qué rango de tiempo podemos hacer predicciones y cuáles son las desviaciones esperadas alrededor de cierto valor promedio, o cuál será el comportamiento promedio del sistema para cierto periodo; todas éstas son incógnitas que podemos evaluar. Asimismo, es posible aprender a dirigir un sistema no en forma directa, sino utilizando sus facultades de auto organización y con el ajuste de criterios adecuados de control. La naturaleza, sin embargo, emplea el caos en forma constructiva: al amplificar las pequeñas fluctuaciones provee sistemas que permiten el acceso a la creatividad. La evolución biológica demanda una variabilidad genética, el caos puede proporcionar un medio para estructurar los cambios azarosos, ofreciendo la posibilidad de poner la diversificación bajo el control de la evolución. Aún más, podemos especular que la creatividad innata en la que viejas y nuevas ideas se conectan debe tener un trasfondo caótico que permite amplificar las fluctuaciones y moldearlas para dar estados mentales macroscópicamente coherentes, los cuales se experimentan como nuevos pensamientos. El caos provee un mecanismo que nos permite tener un libre albedrío en un mundo gobernado por leyes deterministas.

Bibliografía

Contenido:

1. *Libros*
2. *Publicaciones en Scientific American*
3. *Publicaciones en La Recherche*
4. *Para leer después del Caos*

1. Libros

- Howden, *Chaos*, Princeton University, 1986, EUA.
- A. Rosenblueth, *Mente y cerebro*, Siglo XXI, 1985, México.
- D. Hofstadter, «Methamagical Themas», 245, 16 (1981).
- E. Braun, *Un movimiento en zigzag*, La Ciencia desde México, 13, FCE.
- E. Cesarman, *Orden y caos*, Gernika, 1986, México.
- E. Cesarman, N. Brachfeld, *Termodinámica del corazón y del cerebro* , CONACYT, 1981, México.
- E. Gortari, *Ensayos filosóficos sobre la ciencia moderna*, Grijalbo, 1984, México.
- G. Baker, J. Gollub, *Chaotic Dynamics*, Cambridge University, 1991, EUA.
- H. Poincaré, Science and Method, Dover, 1952, EUA.
- Ekeland, *El cálculo, lo imprevisto*, Breviarios FCE, 1988, México, —, *Au Hasard*, Seuil, 1991, París.
- J. L. Borges, *Ficciones*, Alianza Editorial, 1991, México.
- J. Nuño, *El pensamiento de Platón*, FCE, 1988, México.
- J. Soberón, *Ecología de poblaciones*, La Ciencia desde México, 82, FCE, 1991, México.
- K. Popper, *La lógica de la investigación científica*, REI, 1991, México.
- L. García-Colín, R. Rodríguez, *Líquidos exóticos*, La Ciencia desde México, 104, FCE, 1992, México.
- S. Scott, *Chemical Chaos*, Clarendom Press, 1991, Oxford.

2. Publicaciones en Scientific American

- J. Crutchfield y colab., «Chaos», 255,46 (1986).

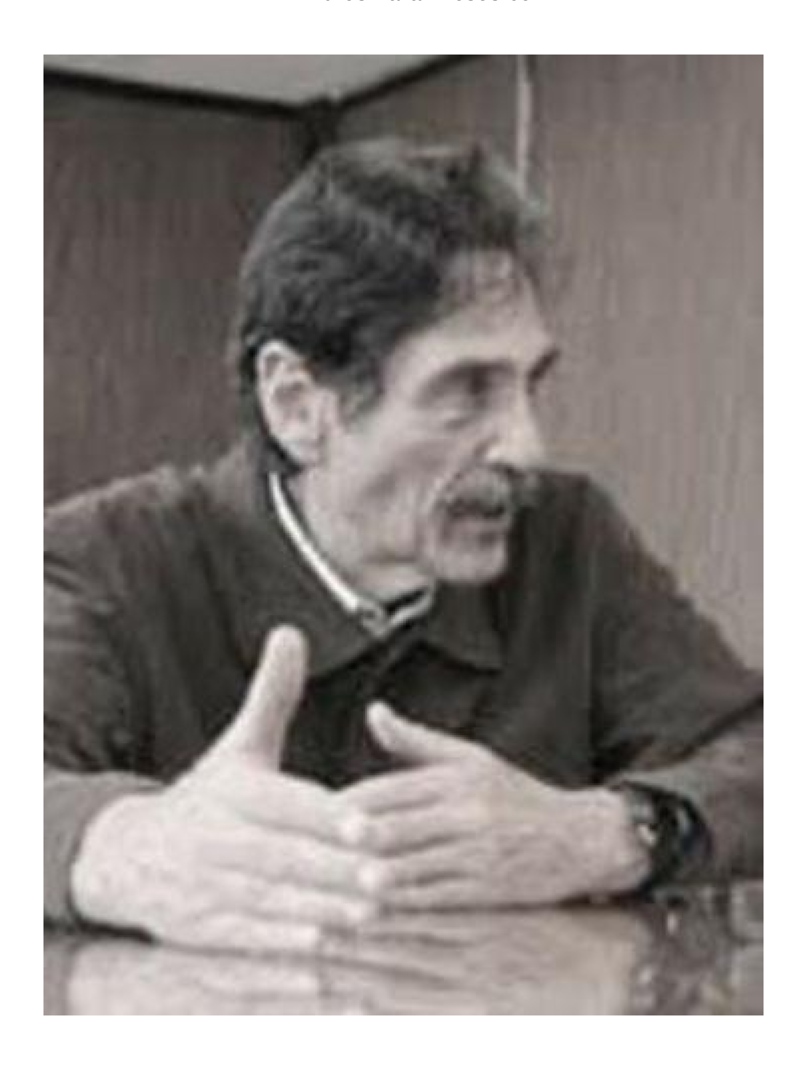
- J. Ottino, «The Mixing of Fluids», enero, 40 (1989).
- Epstein, «Oscillating Chemical Reactions», 248, 112 (1983).
- R. Ruthen, «Adapting to Complexity», enero, 110 (1993).
- S. Kauffman, «Antichaos and Adaptation», agosto, 64 (1991).
- W. Freeman, «The Physiology of Perception», febrero, 34 (1991).

3. Publicaciones en La Recherche

- C. Nicolis, «Le Climat peut-il basculer», 584, 22 (1991).
- D. Ruelle, «Les Atracteurs Etranges», 111, 132 (1980).
- H. Haken y A. Wunderlin, «Le Chaos Deterministe», 1248, 21(1990).
- J. Chabert y A. Dalmedico, «H. Poincaré, le Precurseur», 566, 22 (1991).
- J. Laskar y C. Froeschlé, «Le Chaos dans le Systeme Solaire», 572, 22 (1991).
- L. Kadanoff y colab., «Turbulence dans une boite», 628, 22 (1991).
- P. Thuiller, «La Revanche du dieu Chaos», 542, 22 (1991).
- R. May, «Le Chaos en Biologie», 588, 22 (1991).

4. Para leer después del Caos

- J. Cohen y I. Stewart, *The Collapse of Chaos*, Viking Press, (1994).



ISAAC SCHIFTER SECORA. Estudió la carrera de Química en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Realizó un doctorado en Química en la Universidad Claude Bernard de Lyon, Francia.

Trabaja en el Instituto Mexicano del Petróleo, donde ha ocupado diversos puestos en la investigación relacionada con temas de la industria petrolera, como por ejemplo, líder de proyecto en los programas de Integridad de Ductos. El doctor Schifter realiza investigación en catálisis y materiales, problemas de protección ambiental y dirige un grupo dedicado al estudio de problemas relacionados con la transformación de energéticos.

Cuenta con numerosas patentes a su nombre fruto de la investigación realizada en el Instituto Mexicano del Petróleo.

Ha impartido clases en el Departamento de Ciencias Básicas, División de Ciencias Básicas e Ingeniería de la UAM-Azcapotzalco. Pertenece a la Comisión Dictaminadora del Área de Ingeniería del SNI.

Pertenece al Sistema Nacional de Investigadores y en 1994 la Sociedad Química de México le otorgó el Premio Nacional de Química «Andrés Manuel del Río» en el área de Desarrollo de Tecnología.

Ha publicado numerosos libros de divulgación de la ciencia como son:

La huella invisible: humos, polvos y perfumes (2009).

La tierra tiene fiebre, en coautoría con Carmen González Macías (2005).

La zeolita. Una piedra que hierve, en coautoría con Pedro Bosch.

Usos y abusos de las gasolinas, en coautoría con Esteban López Salinas.

Las arcillas. El barro noble, en coautoría con José Manuel Domínguez.

La Ciencia del caos (1996).